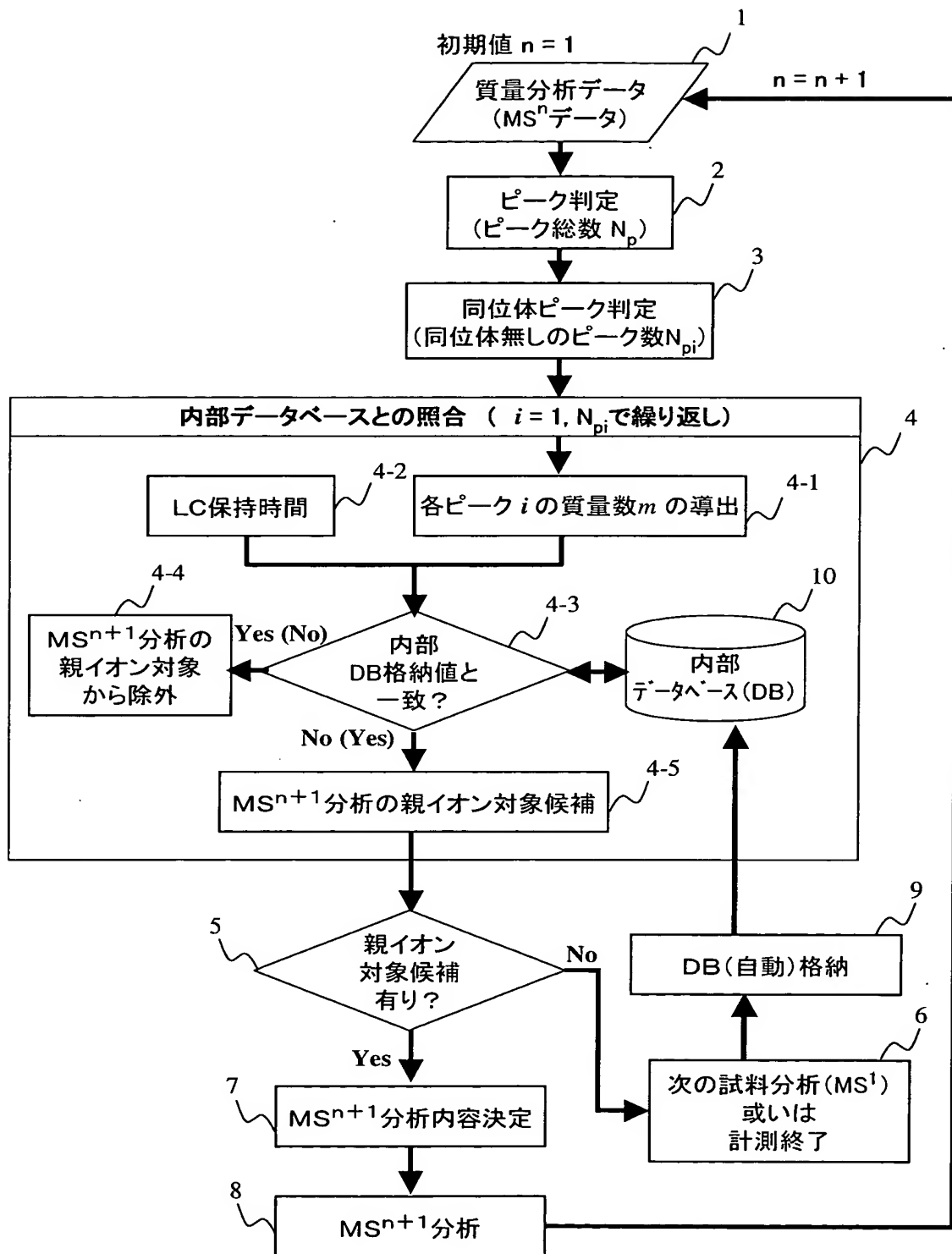
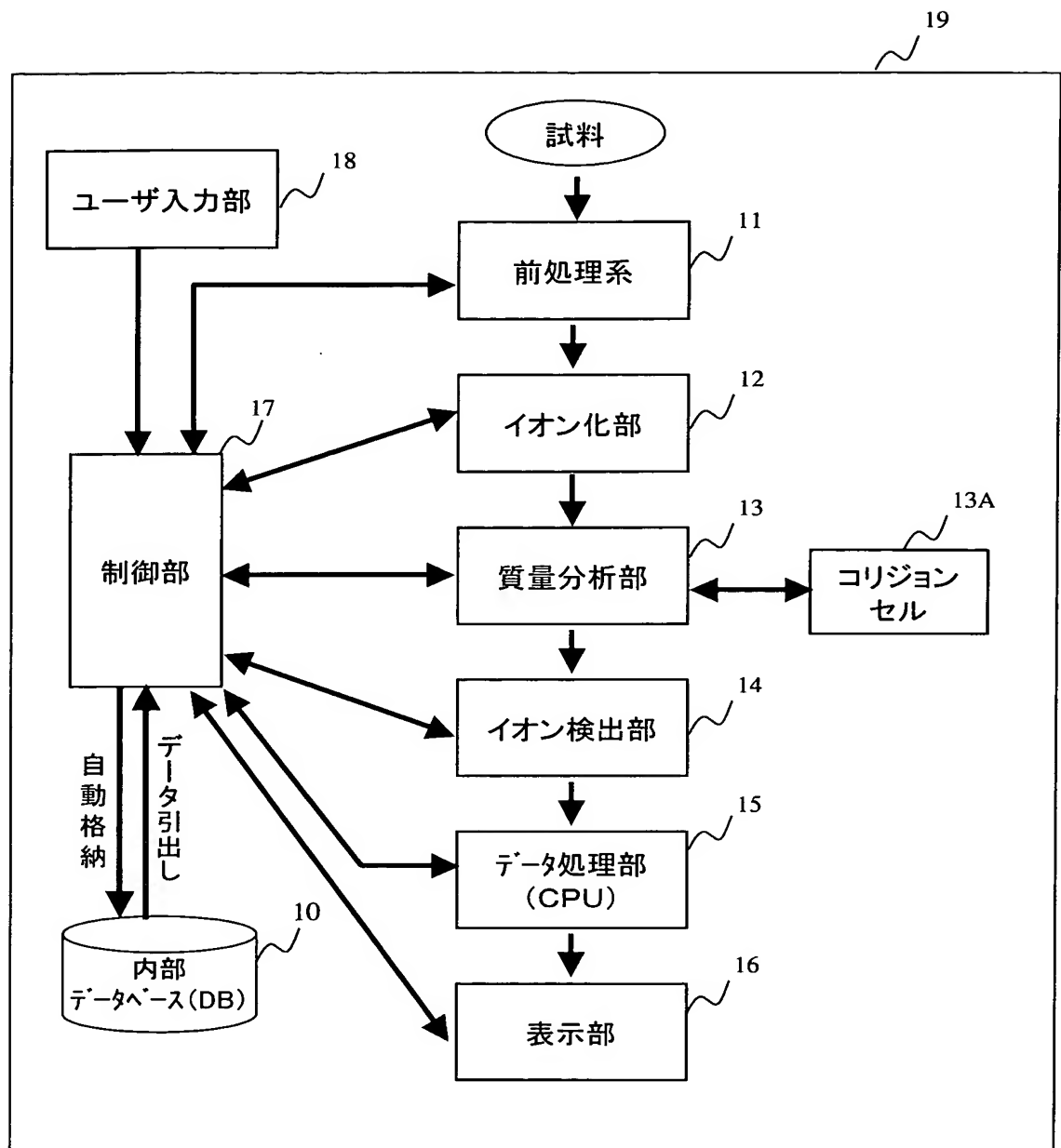


第1図

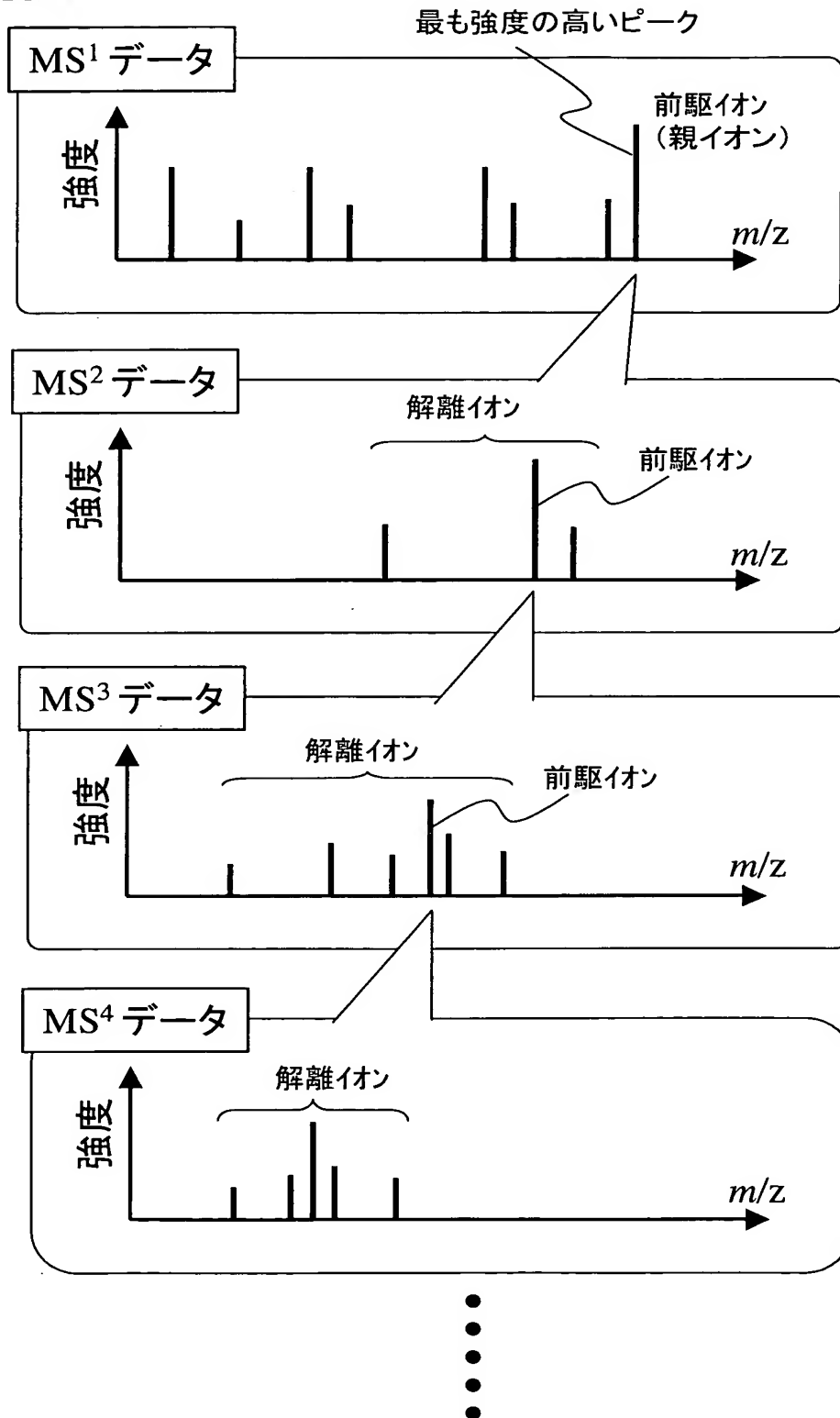


第2図



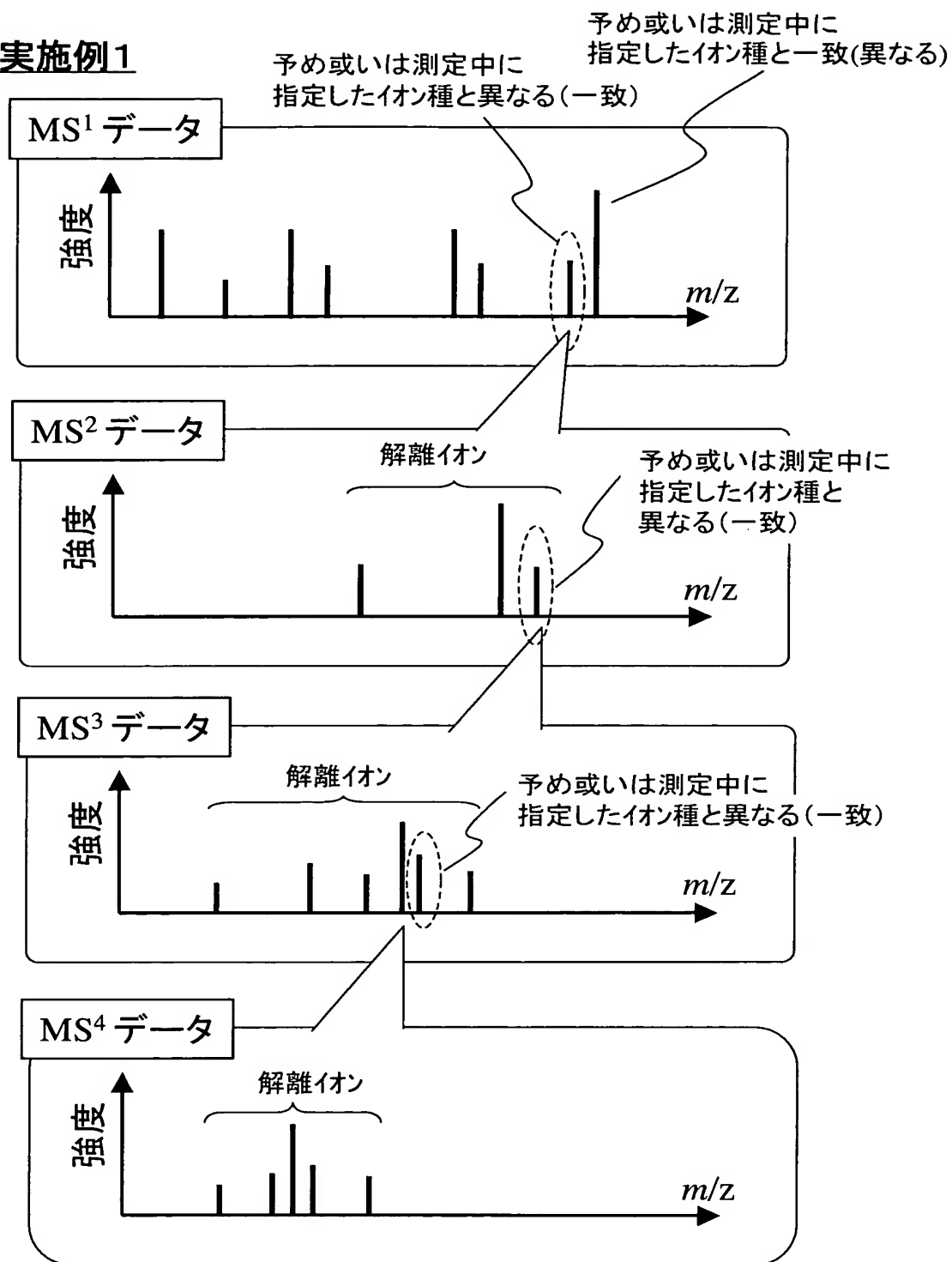
第3A図

従来法



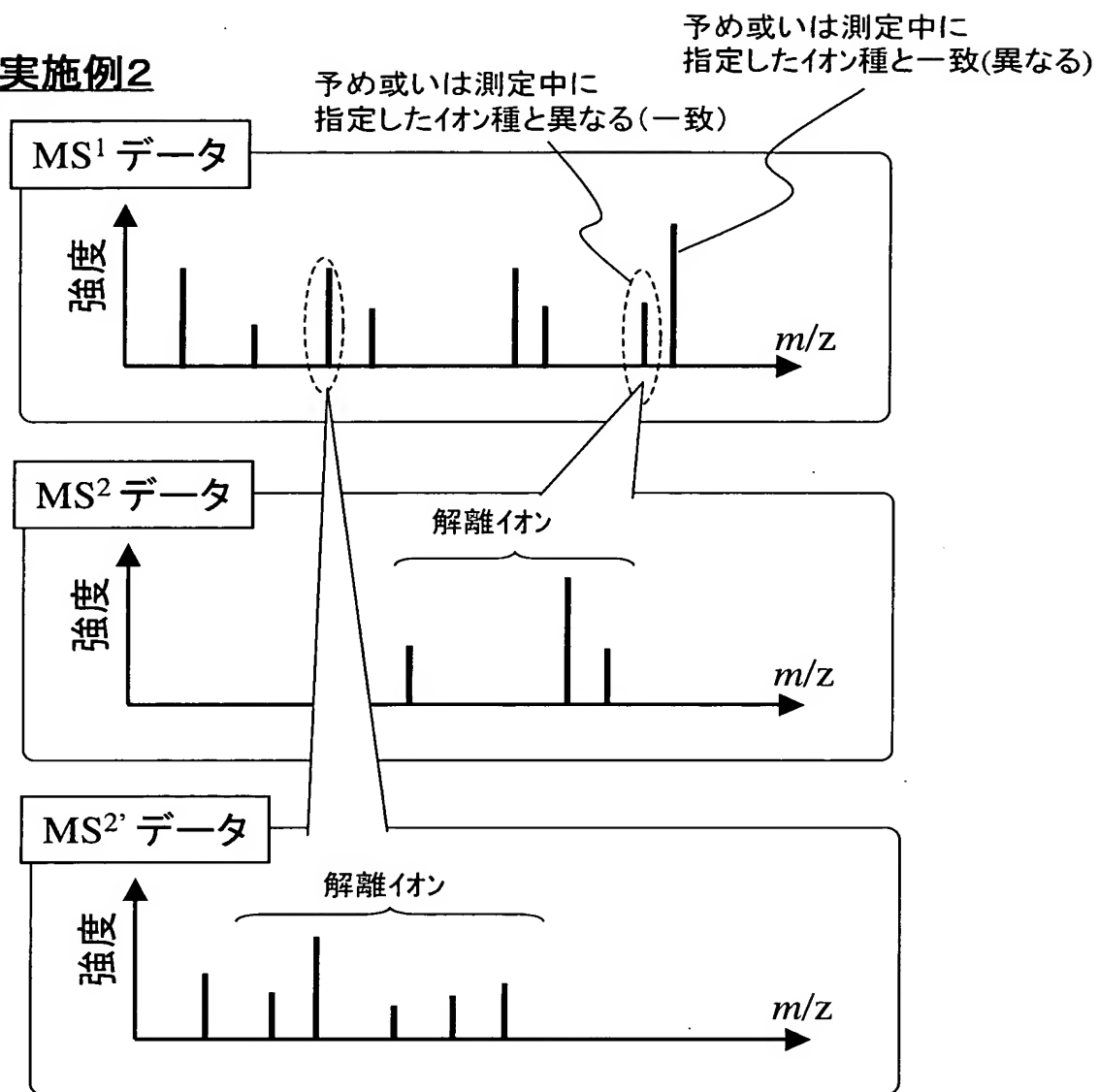
第3B図

本実施例1



第3C図

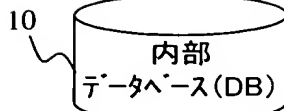
本実施例2



第4図



第5図



内部 DBの内容

- 一度、MSⁿ ($n \geq 2$)計測終了したペプチドの特性データ
(質量数 m , LCの保持時間 τ , 価数 z , 質量対電荷比 m/z , 検出強度 I , 分析条件)

ペプチド名/配列	m [Da]	z [-]	m/z	I	τ [min]	分析条件(例: タンデム分析回数)
ペプチドA	200	1	200	15160	20	2
ペプチドB	700	2	350	2100	28	3
ペプチドC	450	1	450	4754	35	2
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

- 一度同定したタンパク質或いはタンデム分析対象から除外したいタンパク質由来のペプチドの特性データ
(タンパク質名やID番号, 質量数 m , LCの保持時間 τ , 価数 z , 質量対電荷比 m/z , 検出強度 I , 分析条件)

ペプチド名/配列	蛋白質名	m [Da]	z [-]	m/z	I	τ [min]	分析条件(例: タンデム分析回数)
ペプチドA	蛋白質A	570	1	570	25010	25	2
ペプチドB	蛋白質A	652	1	652	3140	32	3
ペプチドC	蛋白質A	652	2	326	58754	45	2
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
ペプチドD	蛋白質B	1042	2	521	6456	22	2
ペプチドE	蛋白質B	718	2	359	3080	35	3
ペプチドF	蛋白質B	671	2	335.5	8054	48	3
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

- 一度、MSⁿ ($n \geq 2$)計測終了した糖鎖の特性データ
(質量数 m , LCの保持時間 τ , 価数 z , 質量対電荷比 m/z , 検出強度 I , 分析条件)

糖鎖名/構造	m [Da]	z [-]	m/z	I	τ [min]	分析条件(例: タンデム分析回数)
糖鎖A	1002	2	501	15710	55	2
糖鎖B	840	2	420	8340	34	3
糖鎖C	1280	2	640	10754	42	2
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

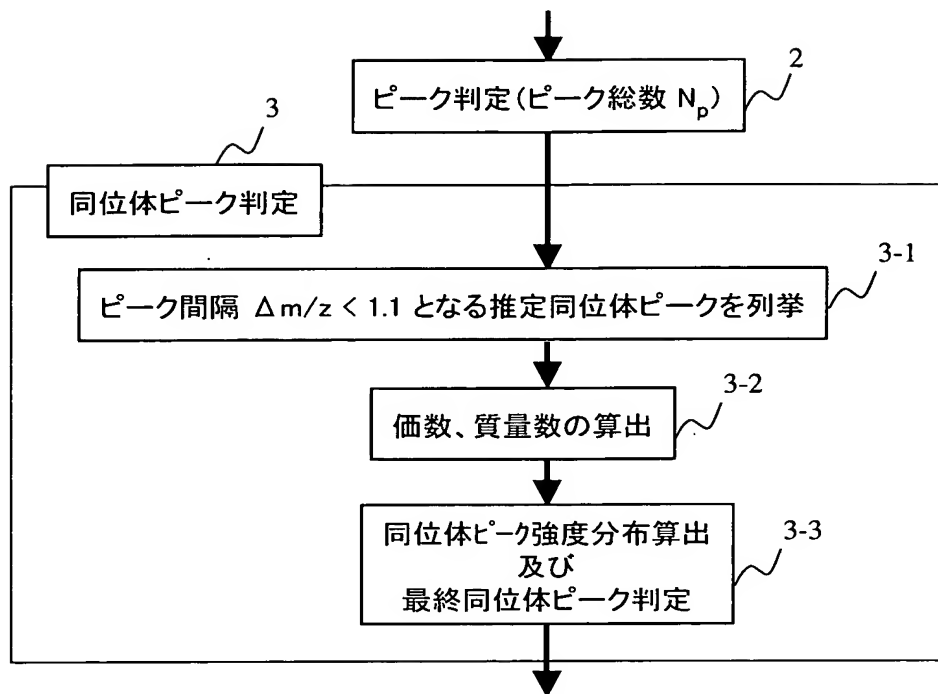
- 一度、MSⁿ ($n \geq 2$)計測終了した化学物質の特性データ
(質量数 m , LCの保持時間 τ , 価数 z , 質量対電荷比 m/z , 検出強度 I , 分析条件)

化学物質名/構造	m [Da]	z [-]	m/z	I	τ [min]	分析条件(例: タンデム分析回数)
化学物質A	270	1	270	85510	23	2
化学物質B	358	1	358	9840	47	2
化学物質C	682	2	341	20764	82	2
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

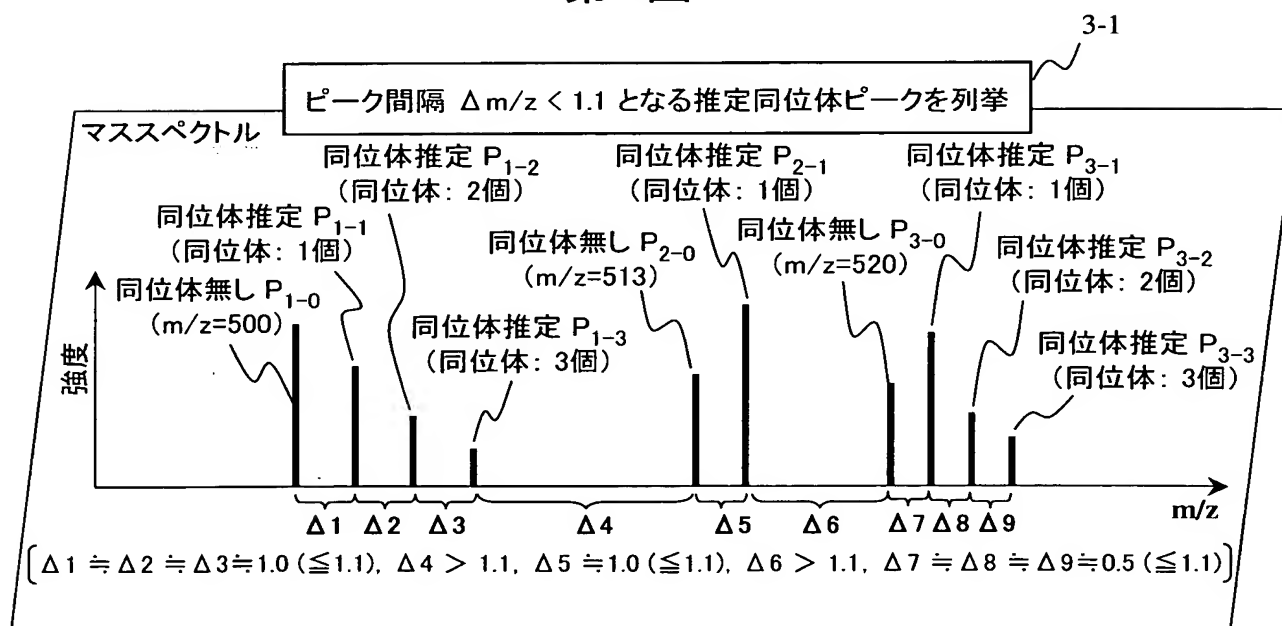
- ノイズや不純物由来のイオン種の特性データ
(質量数 m , LCの保持時間 τ , 価数 z , 質量対電荷比 m/z , 検出強度 I , 分析条件)

m [Da]	z [-]	m/z	I	τ [min]	分析条件(例: タンデム分析回数)
361	1	361	-	15	-
640	1	640	-	40	-
740	1	740	-	31	-
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

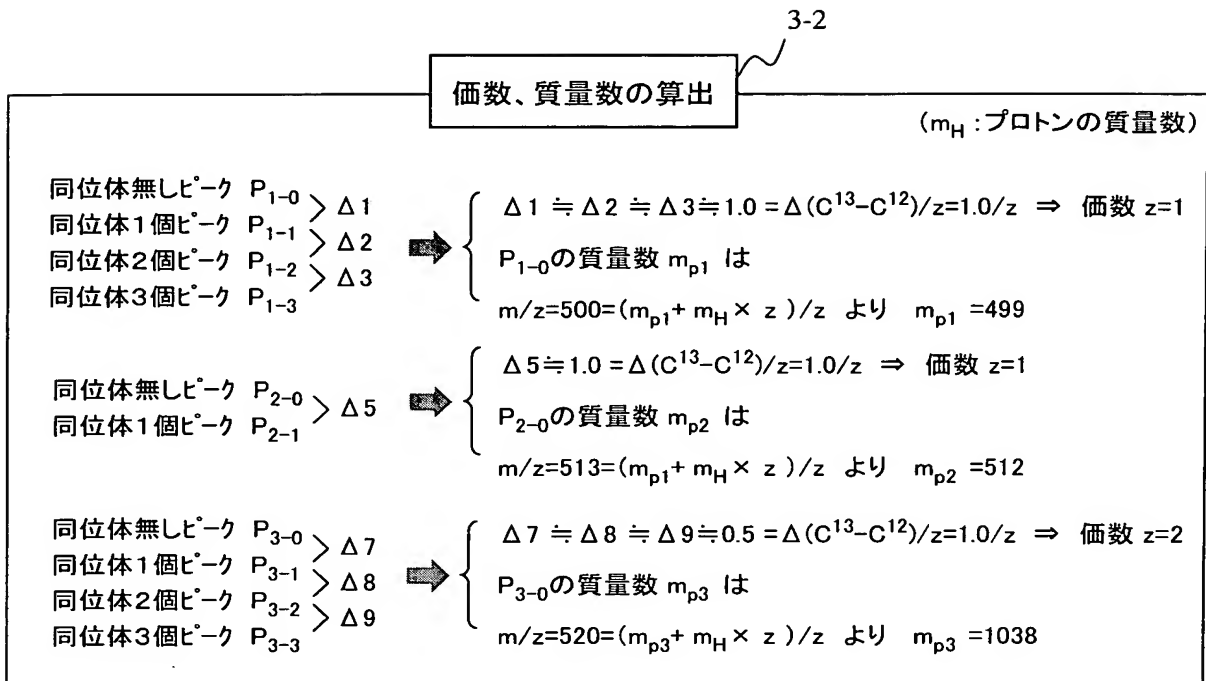
第6図



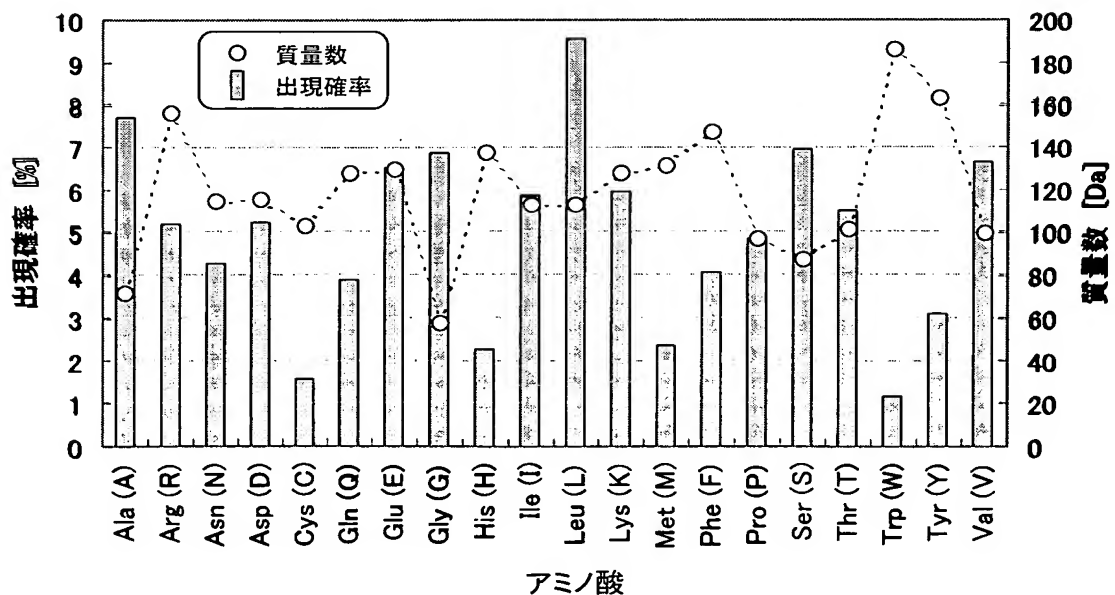
第7図



第8図



第9A図



第9B図

3-3

同位体ピーク強度分布算出 及び 最終同位体ピーク判定

質量数から各元素数の算出

ペプチド ($C_{Nc}N_{Nn}H_{Nh}O_{No}S_{Ns}$) の場合

$$\begin{cases} C \text{ の数: } N_c = m \times n_C / 111.1807 \\ O \text{ の数: } N_o = m \times n_O / 111.1807 \\ N \text{ の数: } N_n = m \times n_N / 111.1807 \\ H \text{ の数: } N_h = m \times n_H / 111.1807 \\ S \text{ の数: } N_s = m \times n_S / 111.1807 \end{cases}$$

表A. 平均アミノ酸 111.1807 [amu] 当たりの各元素数

nC	nO	nN	nH	nS
4.9583	1.4733	1.3547	7.8185	0.0396

同位体ピーク強度分布の算出

同位体 (C^{13}) のみ考慮 の場合

同位体ピーク強度 P_{Nis} (同位体数 が Nis 個の時):

$$P_{Nis} = [N_c C_{Nis} \cdot pC(1)^{(Nc-Nis)} \cdot pC(2)^{Nis}] \times pH(1)^{N_h} \cdot pN(1)^{N_n} \cdot pO(1)^{N_o} \cdot pS(1)^{N_s}$$

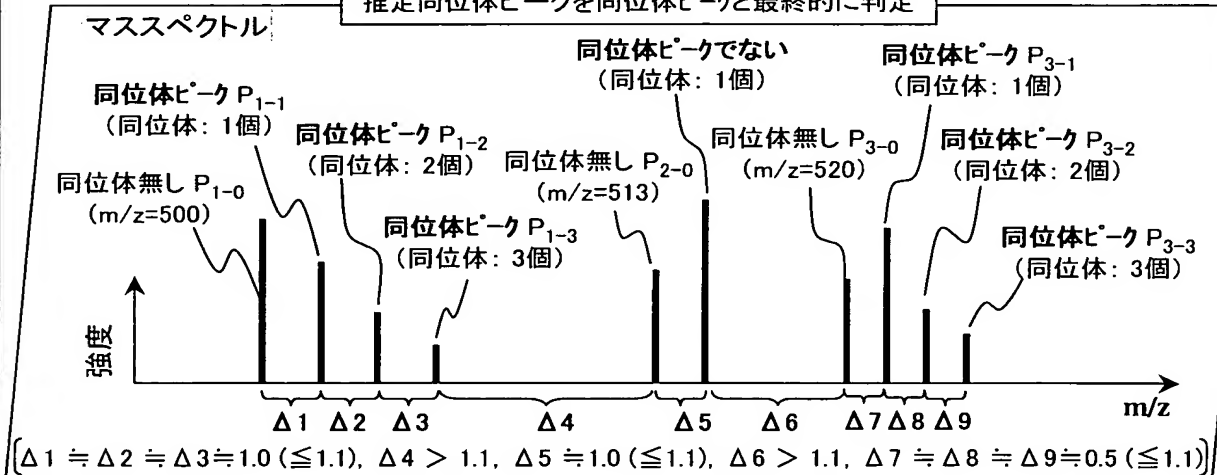
表B. 各同位体元素の質量と存在比

	質量数	存在比
C	mC(1) 12	pC(1) 0.9889
	mC(2) 13.003354	pC(2) 0.0111
H	mH(1) 1.007825	pH(1) 0.9999
	mH(2) 2.014102	pH(2) 0.0001
N	mN(1) 14.003074	pN(1) 0.9963
	mN(2) 15.000108	pN(2) 0.0037
O	mO(1) 15.994915	pO(1) 0.9976
	mO(2) 16.999133	pO(2) 0.0004
	mO(3) 17.999160	pO(3) 0.0020
S	mS(1) 31.972074	pS(1) 0.9502
	mS(2) 32.971460	pS(2) 0.0075
	mS(3) 33.967864	pS(3) 0.0422
	mS(4) 35.967091	pS(4) 0.0001

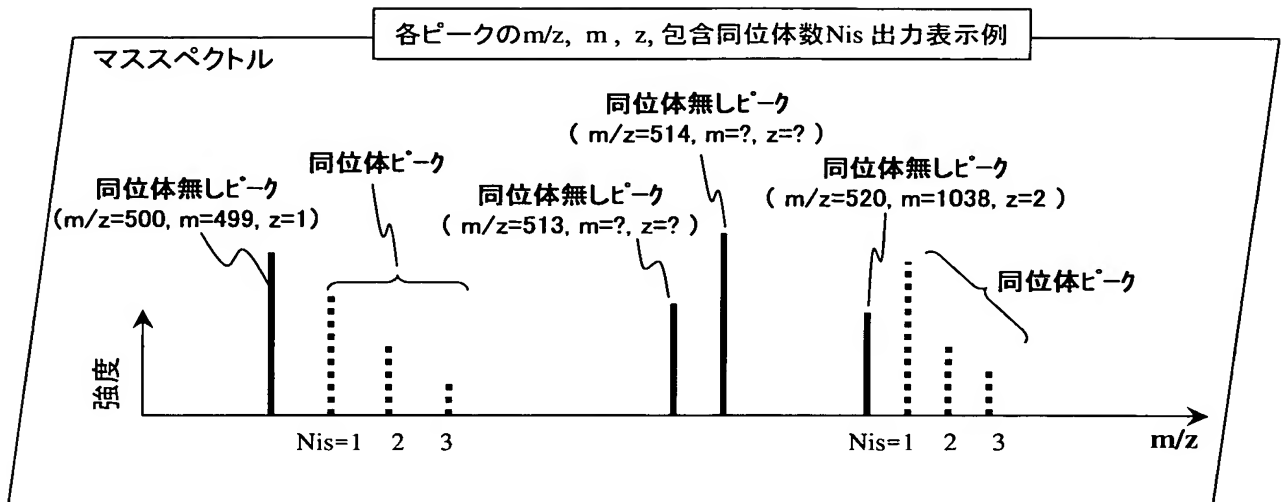
最終同位体ピーク判定

推定同位体ピークのうち、同位体ピークの強度分布算出値 P_{Nis} と
同位体無しピークに対する相対計測強度の相対値が50%未満の誤差で一致

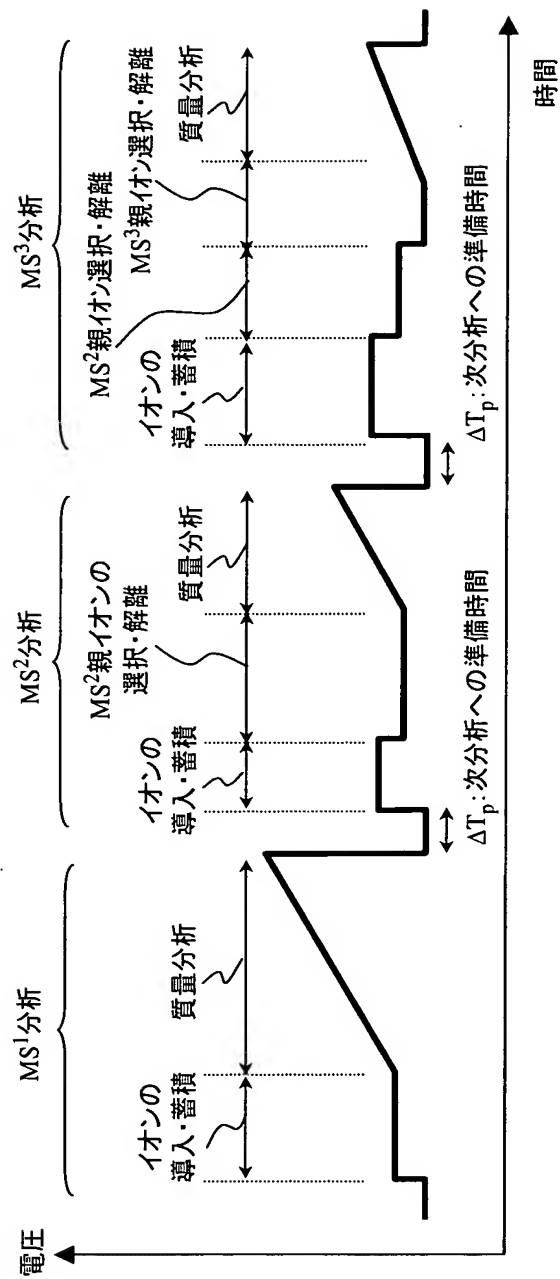
推定同位体ピークを同位体ピークと最終的に判定



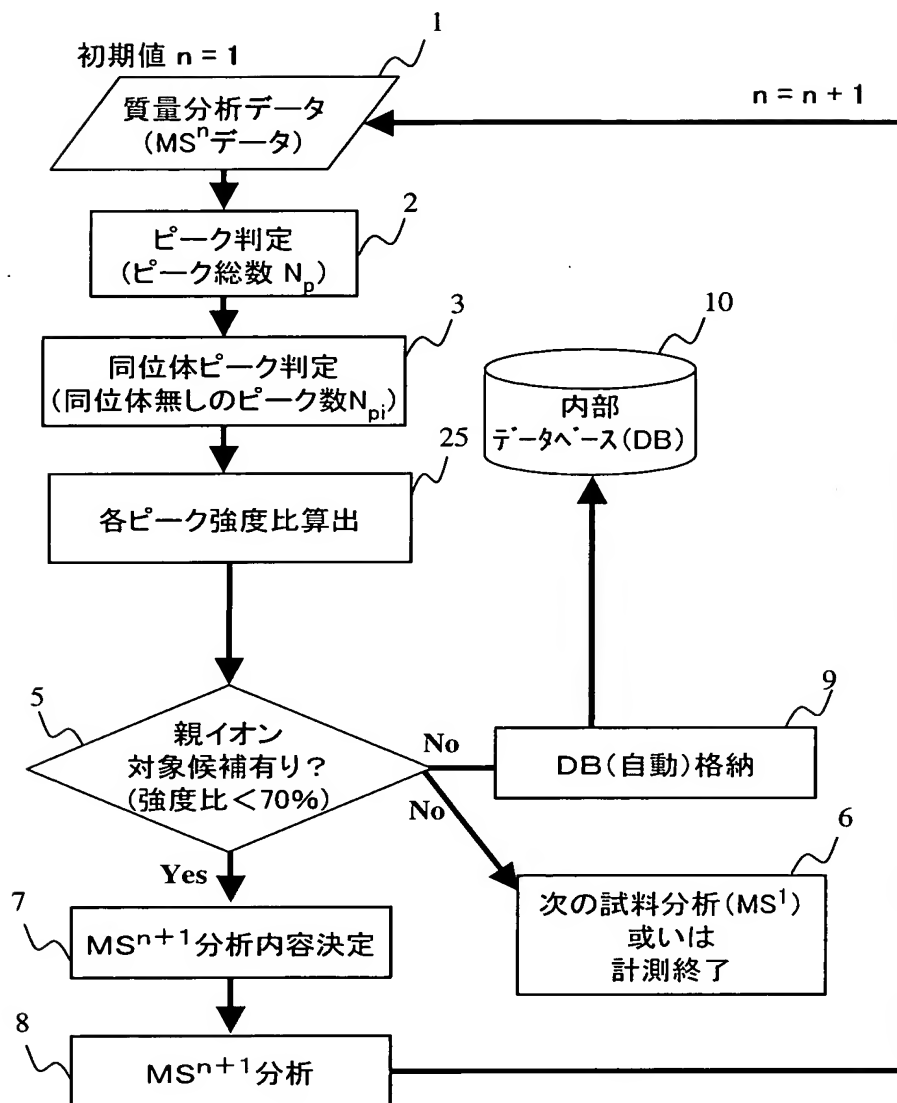
第10図



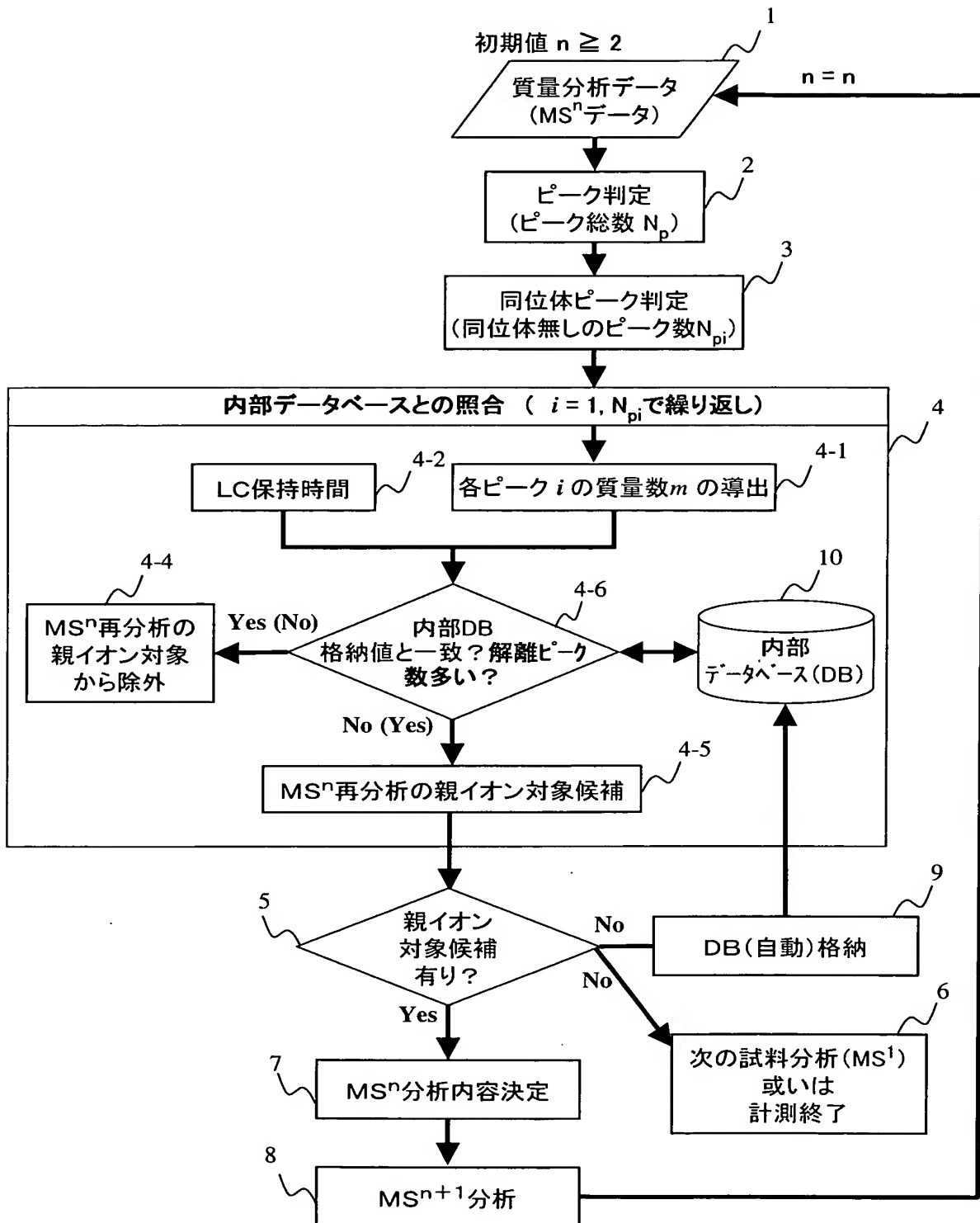
第11図



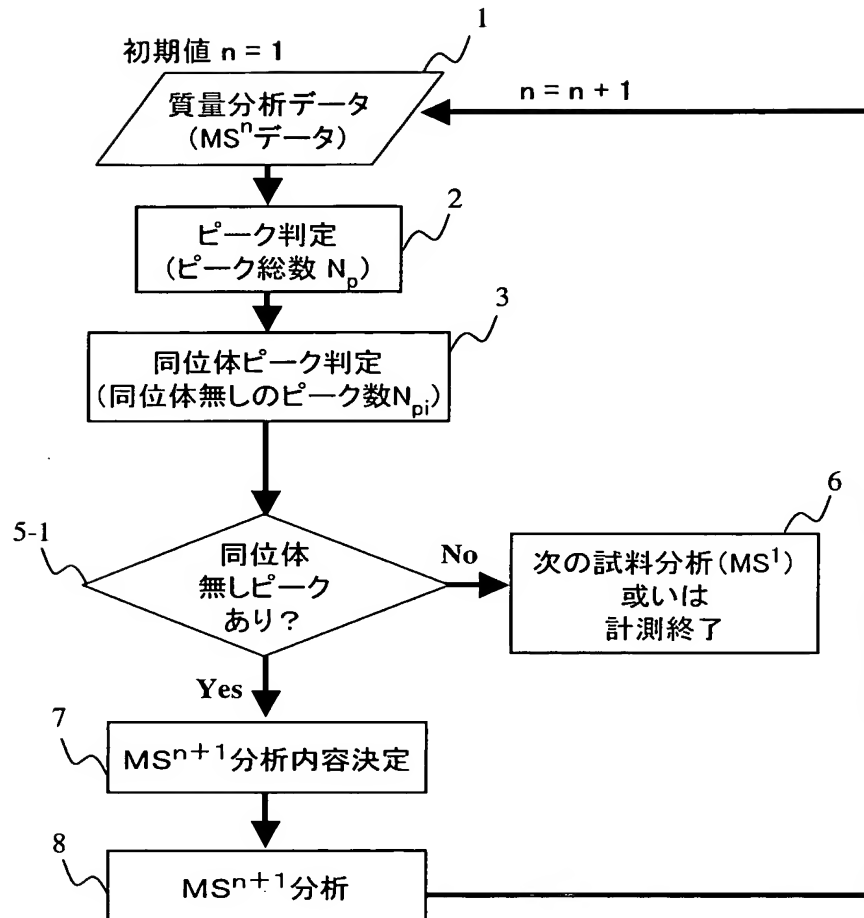
第12図



第13図

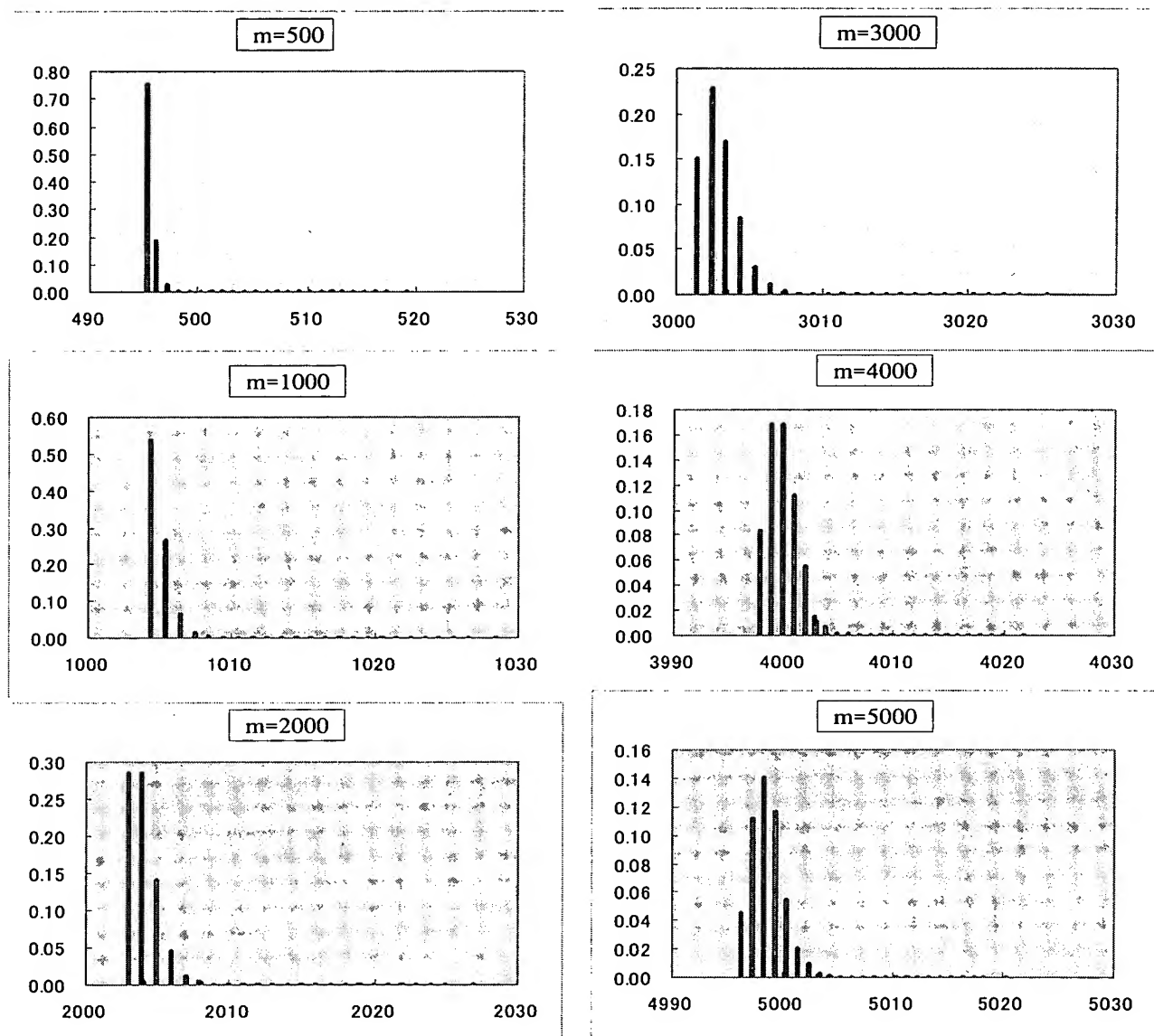


第14図

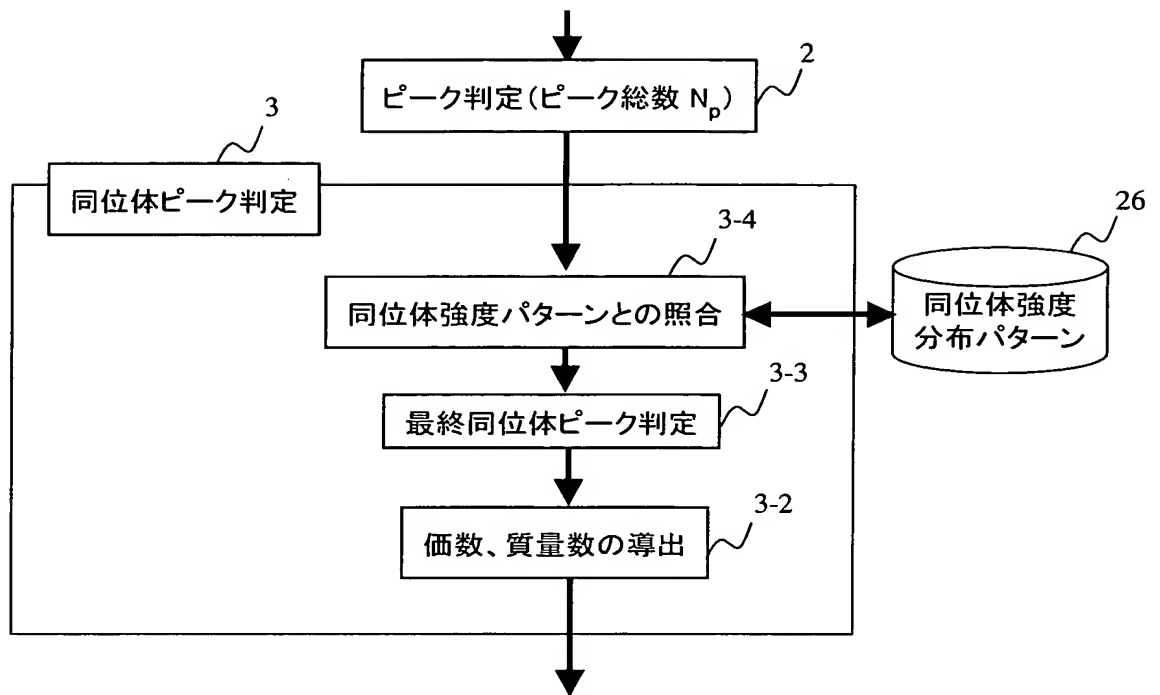


第15図

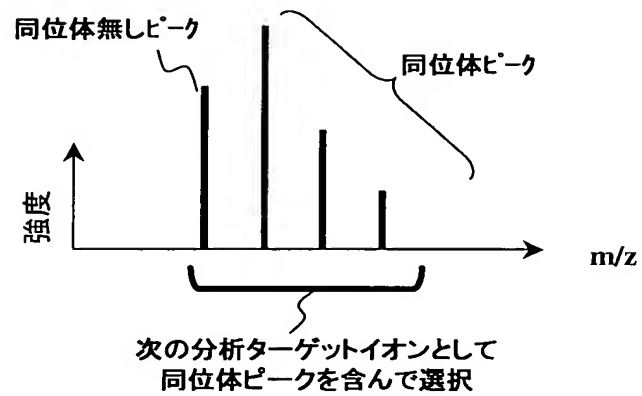
イオン質量数に応じた 同位体ピーク強度分布のパターン



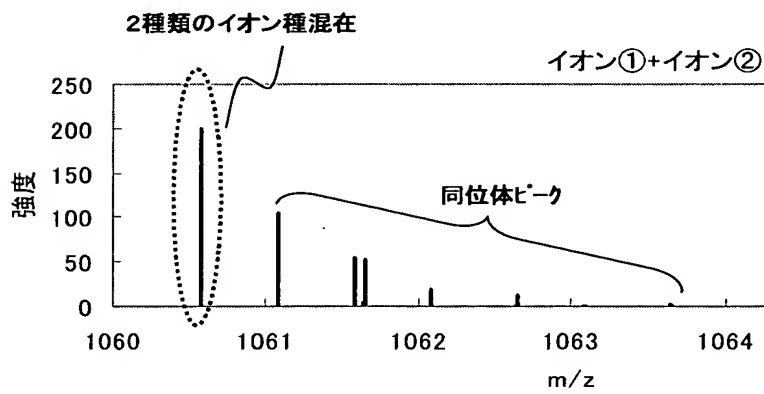
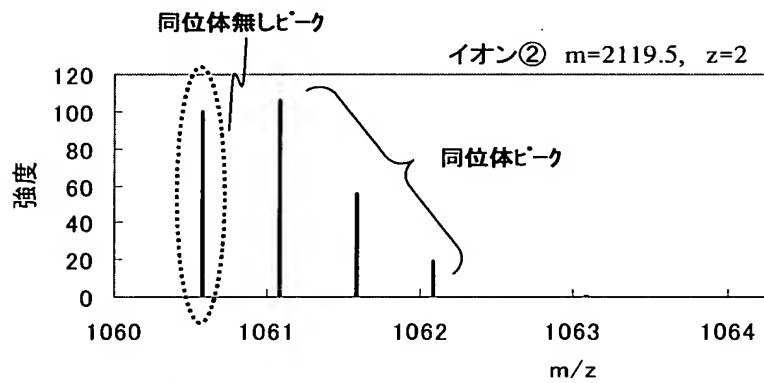
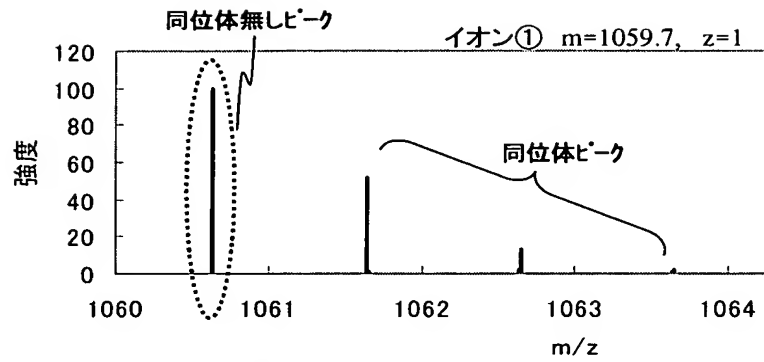
第16図



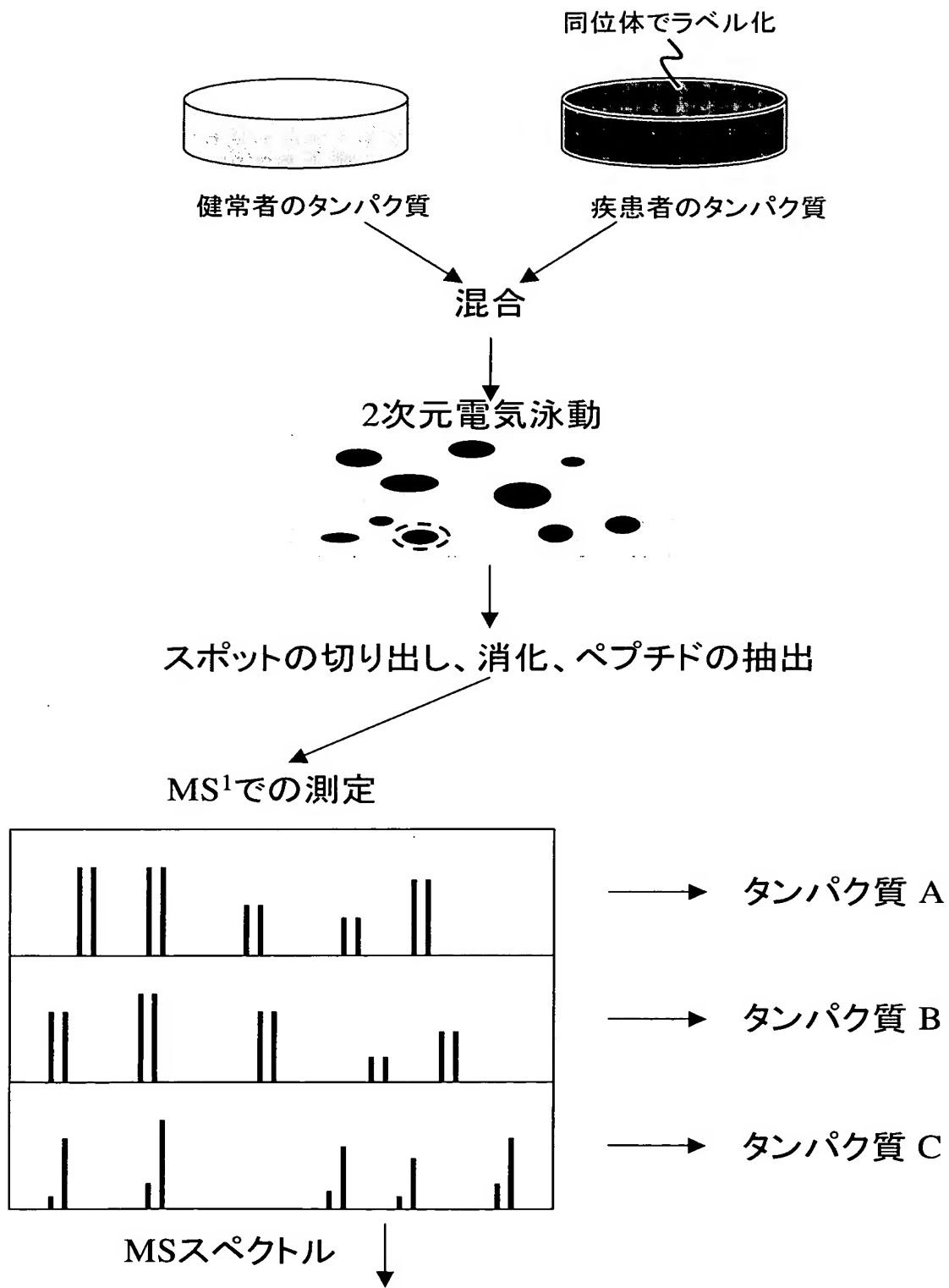
第17図



第18図

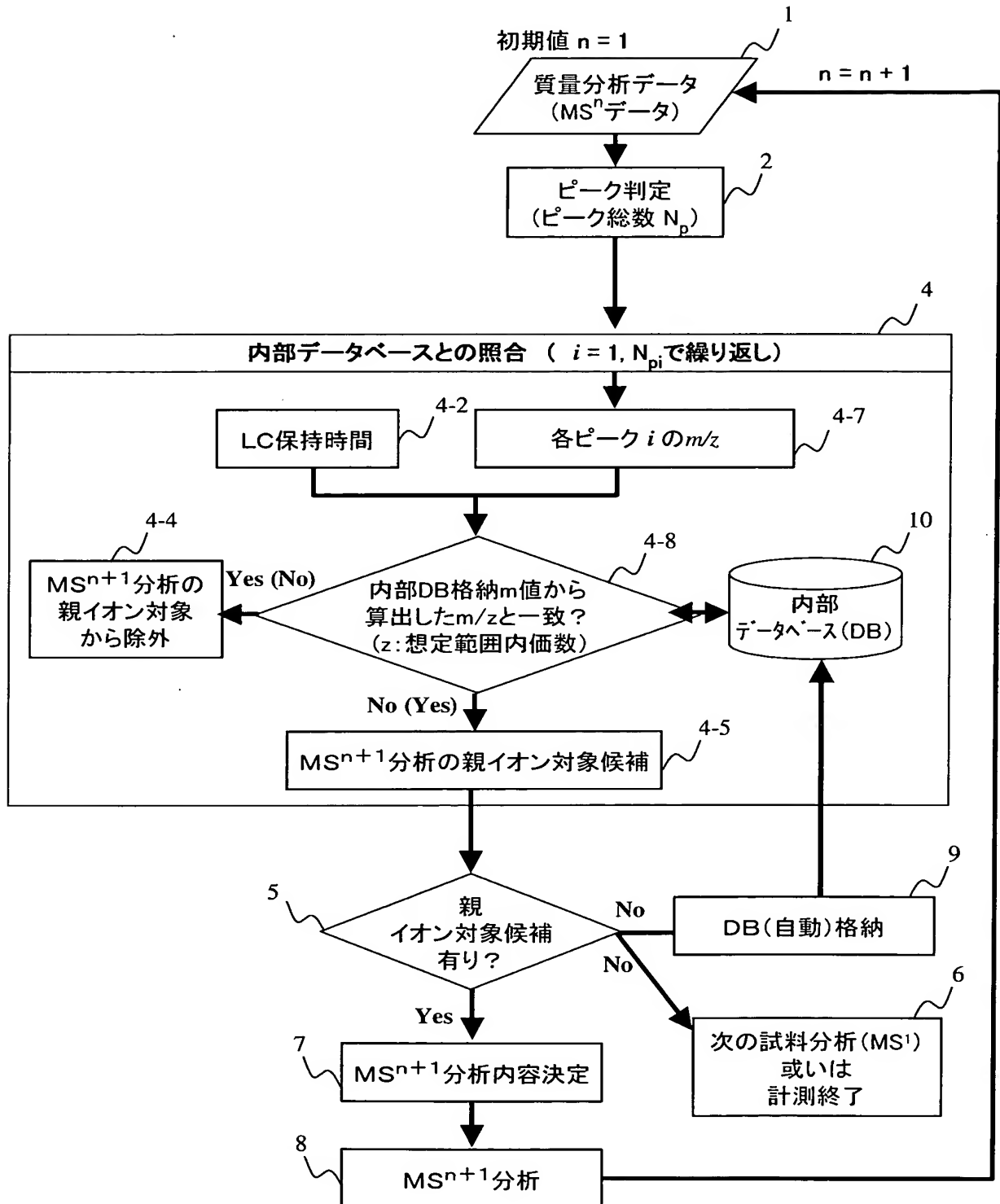


第19図



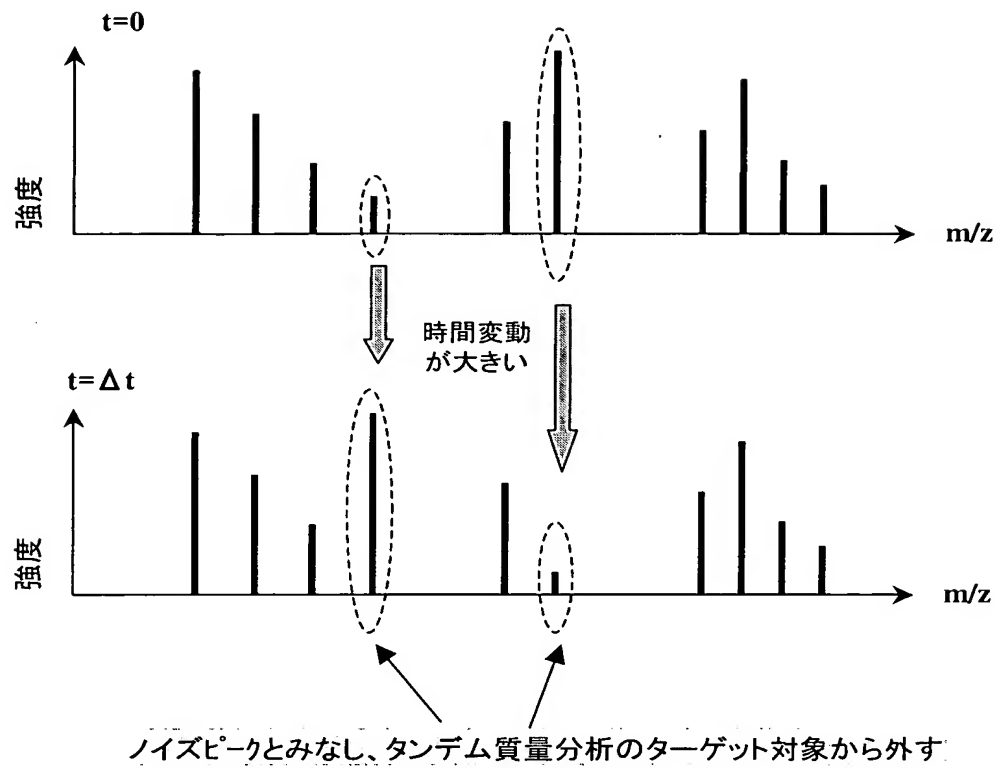
強度比に変化があるタンパク質を次のタンデム質量分析のターゲット

第20図

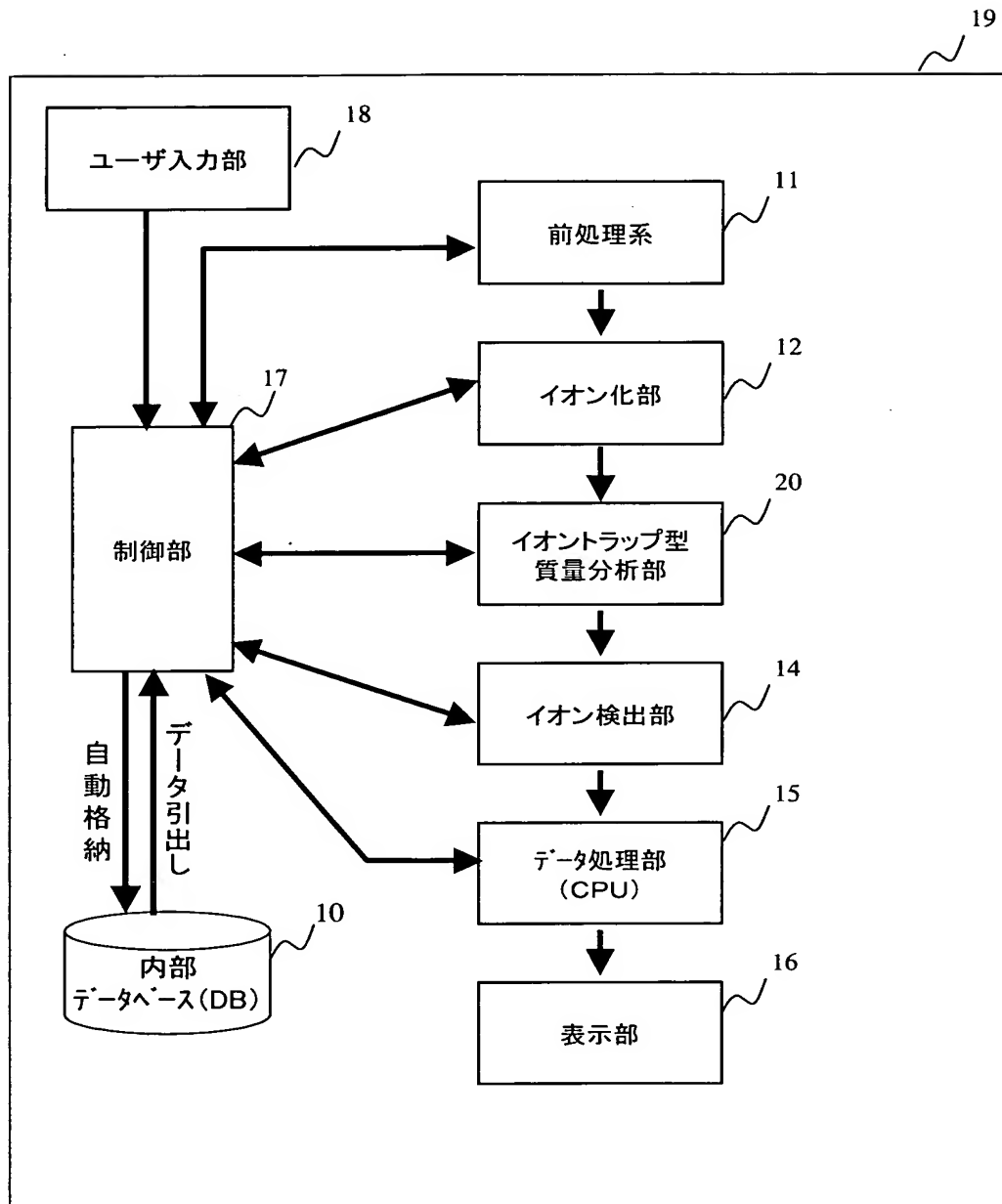


第21図

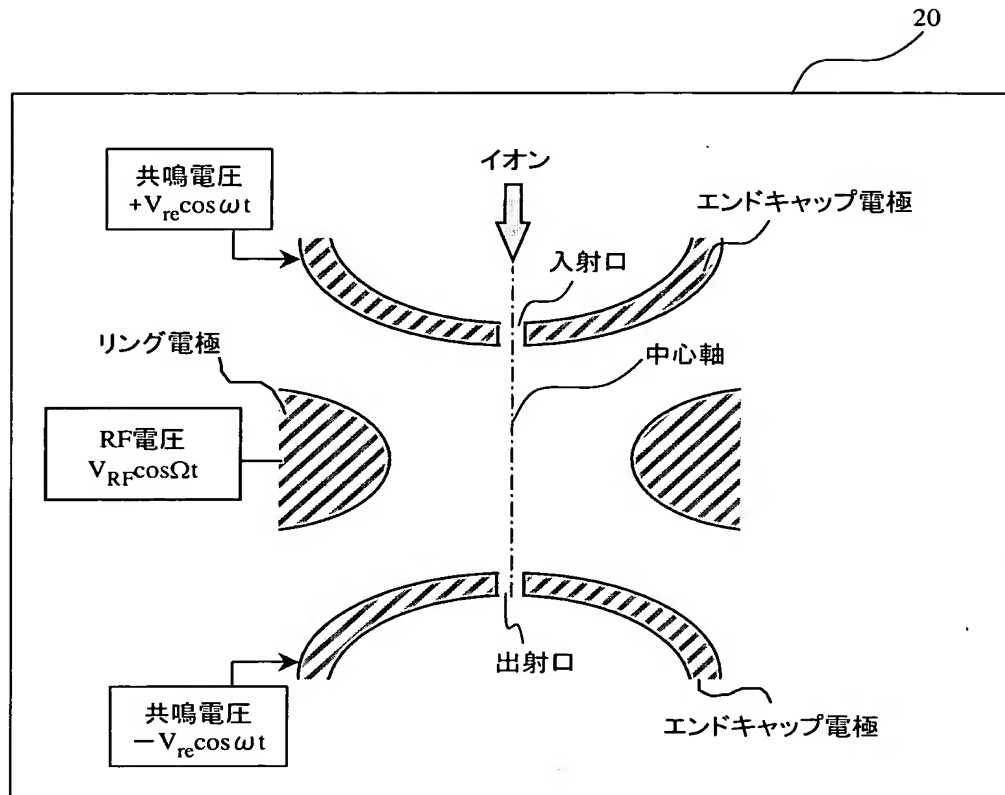
マススペクトル



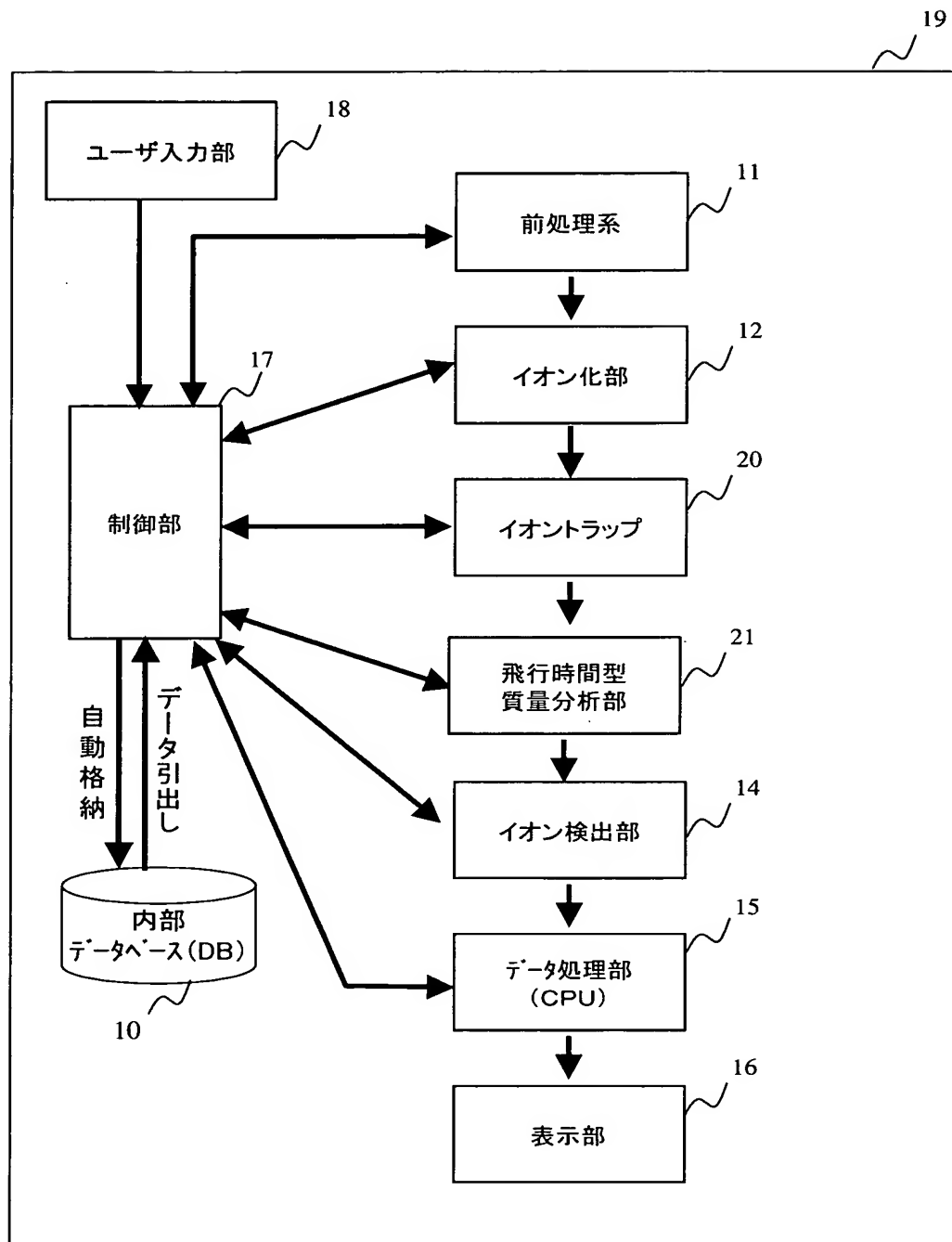
第22a図



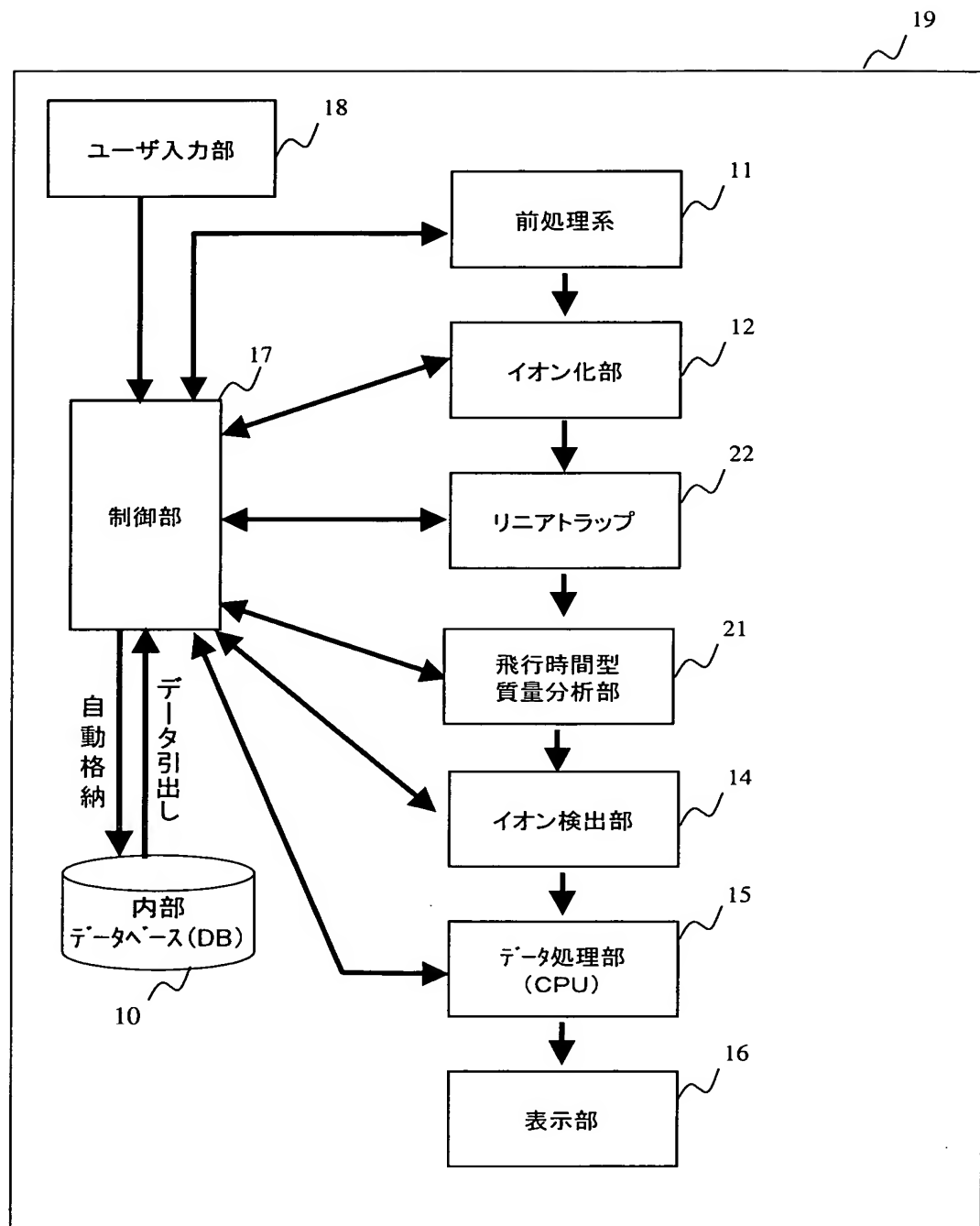
第22b図



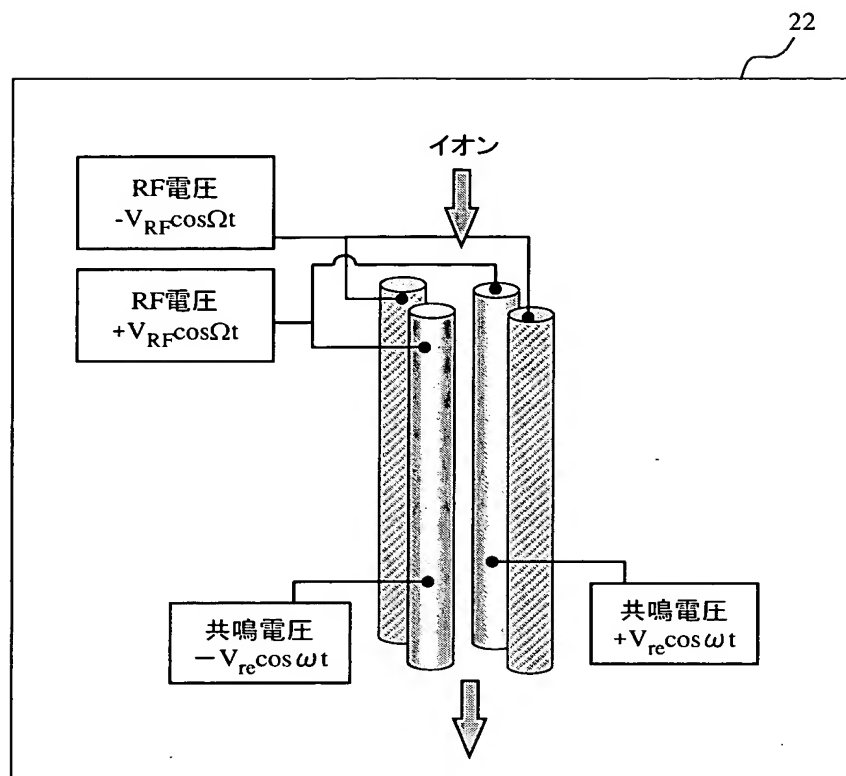
第23図



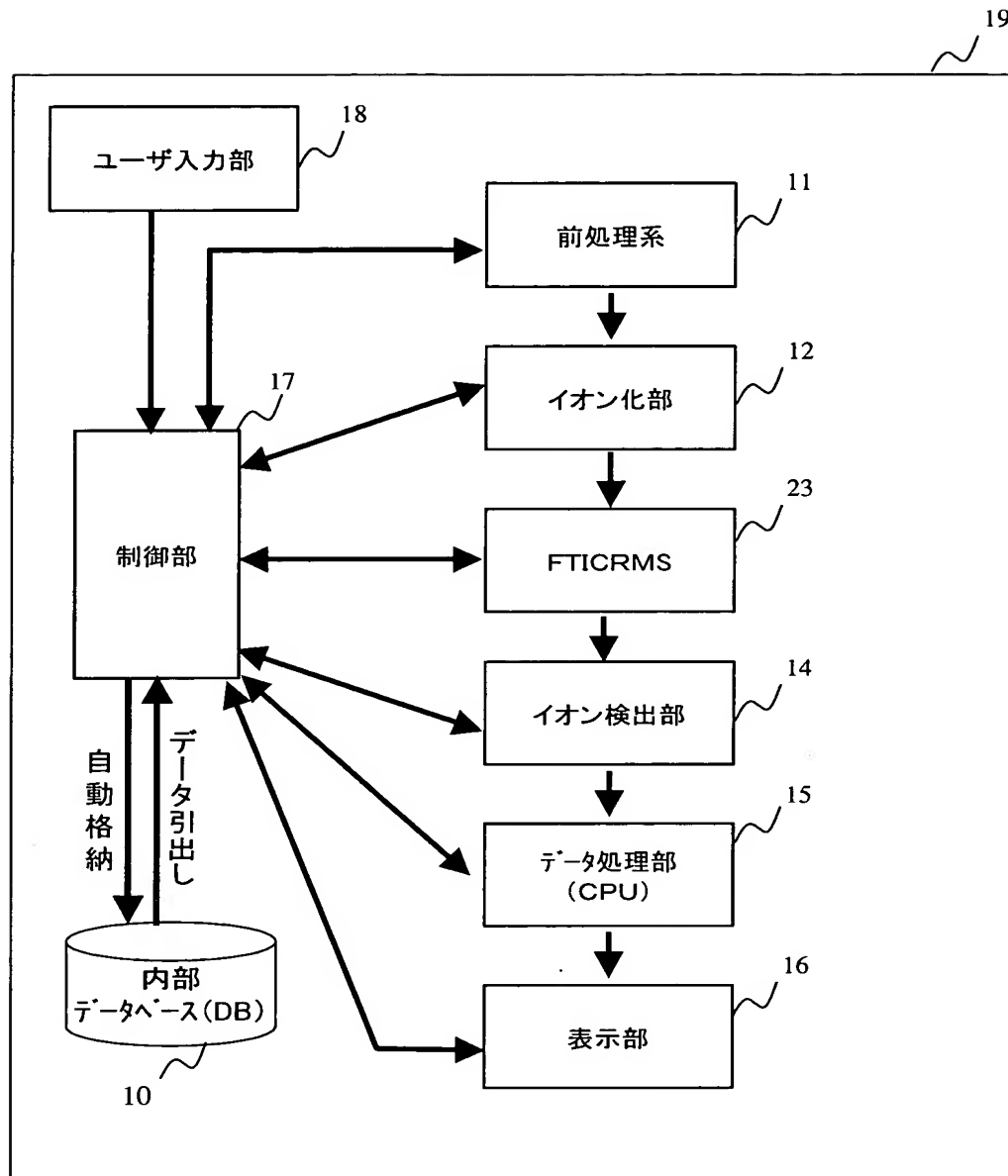
第24a図



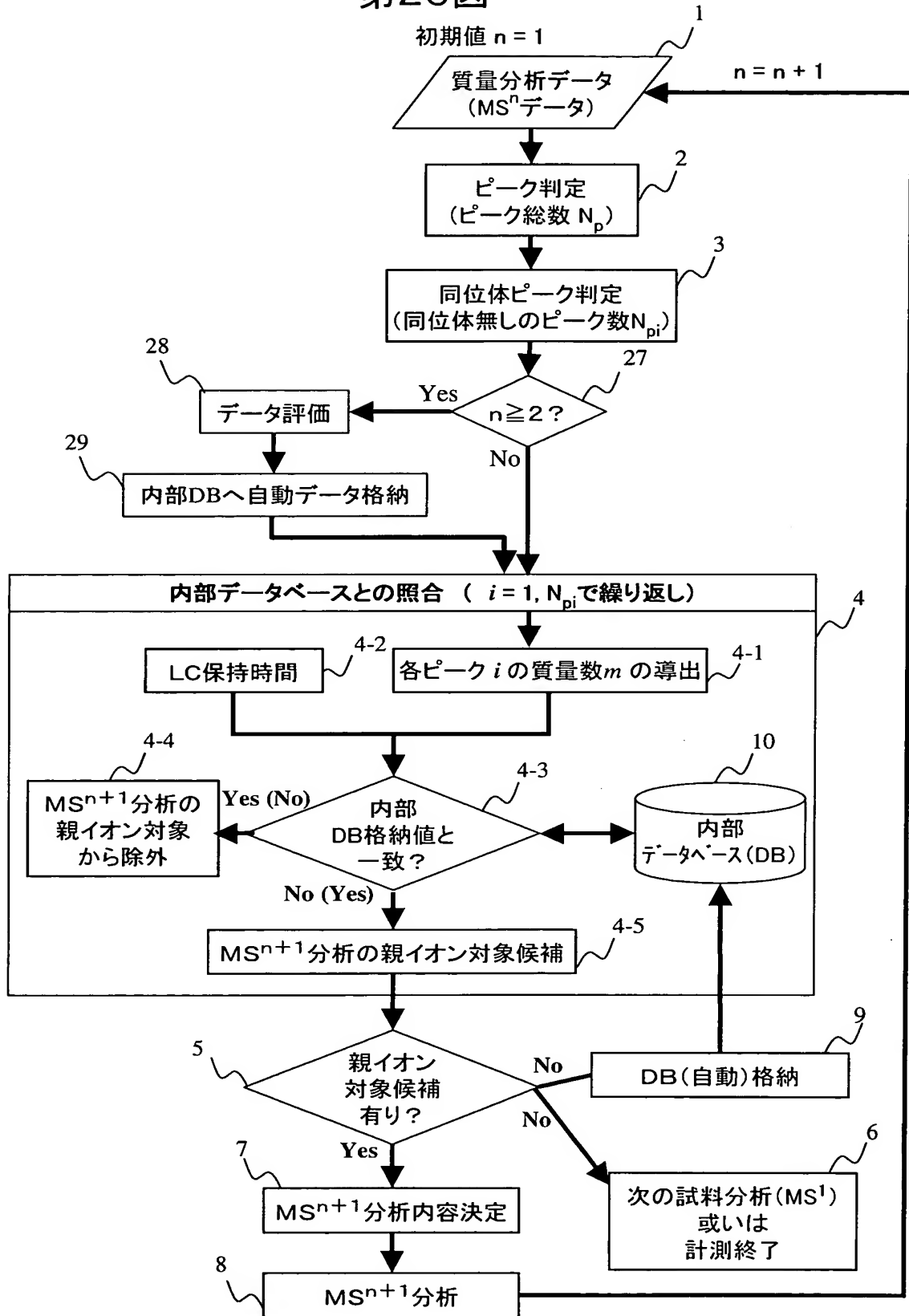
第24b図



第25図



第26図

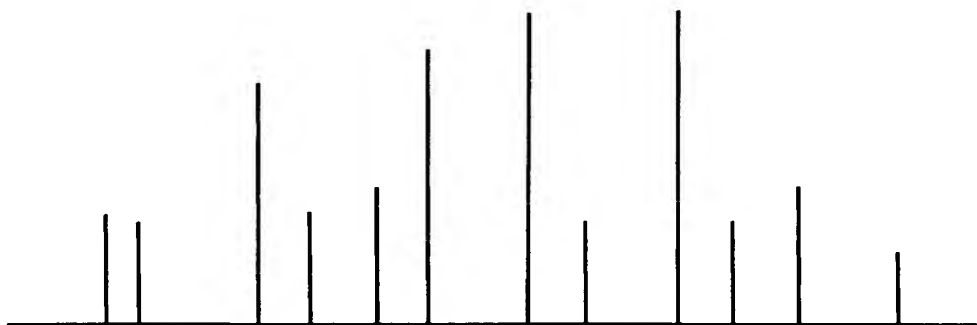


第27図

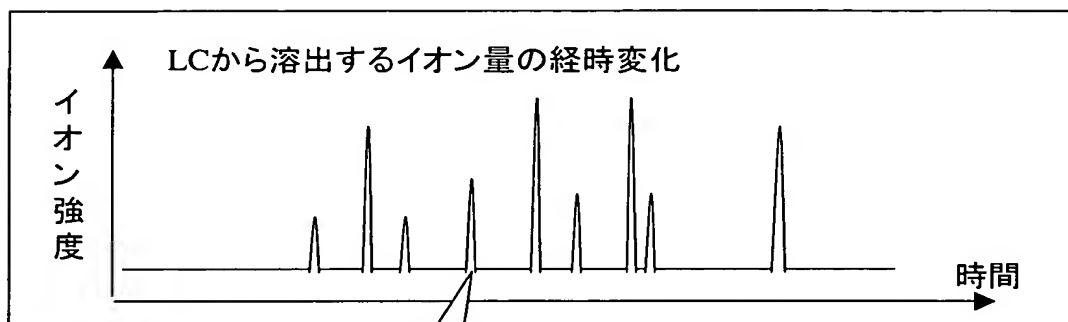
内部データベース

No.	M [Da]	価数z	τ [min]	Accumulation time[msec]	quality
1	921.23	2	24.5	260	5
2	926.09	2	26.9	345	4
3	973.26	2	32.0	289	4
4	700.39	2	34.1	401	5
5	480.66	2	39.2	269	3
6	582.29	2	44.7	159	2
7	1638.66	2	47.8	362	4
8	1954.86	3	50.8	410	5
9	507.8	2	51.1	359	5
10	1510.54	2	57.6	190	3
11	740.25	2	59.8	278	5
12	1478.5	2	61.3	371	4
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

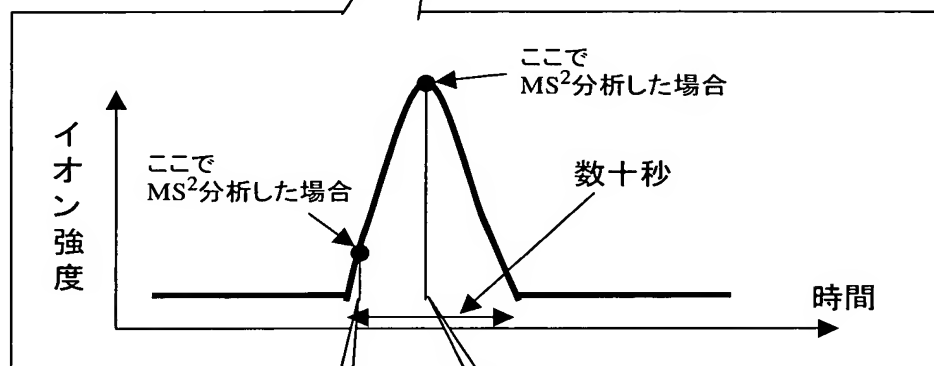
マスペクトルデータ表示



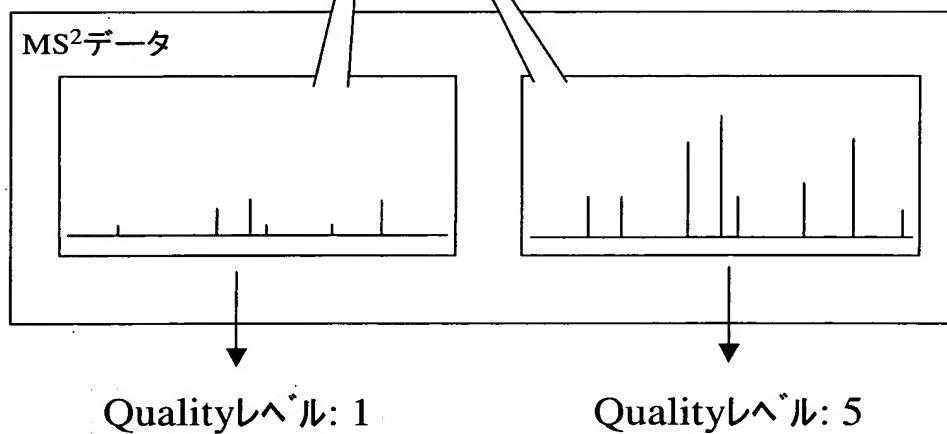
第28A図



第28B図



第28C図



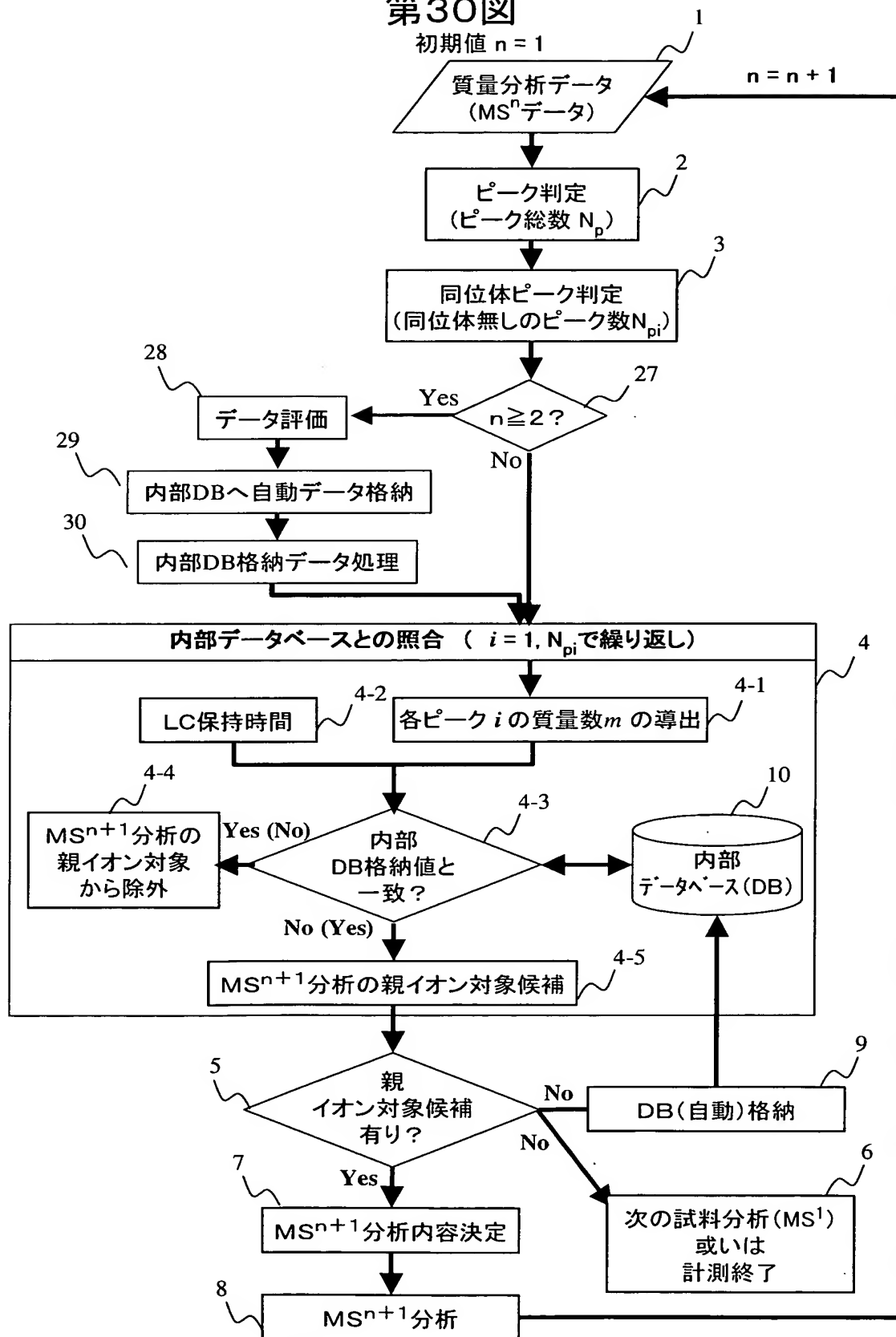
第29図

内部データベース					
No.	M [Da]	価数z	τ [min]	Accumulation time[msec]	quality
1	921.23	2	24.5	260	5
2	926.09	2	26.9	345	4
3	973.26	2	32.0	289	4
4	700.39	2	34.1	401	5
5	480.66	2	39.2	269	3
6	582.29	2	42.7	159	2
7	<u>1638.66</u>	<u>2</u>	<u>47.6</u>	362	2
8	<u>1638.67</u>	<u>2</u>	<u>47.7</u>	359	2
9	<u>1638.65</u>	<u>2</u>	<u>47.7</u>	339	3
10	<u>1638.66</u>	<u>2</u>	<u>47.7</u>	352	3
11	<u>1638.67</u>	<u>2</u>	<u>47.8</u>	254	4
12	<u>1638.68</u>	<u>2</u>	<u>47.8</u>	262	5
13	<u>1638.66</u>	<u>2</u>	<u>47.8</u>	219	5
14	<u>1638.65</u>	<u>2</u>	<u>47.8</u>	285	4
15	<u>1638.66</u>	<u>2</u>	<u>47.8</u>	248	5
16	<u>1638.65</u>	<u>2</u>	<u>47.8</u>	299	4
17	<u>1638.68</u>	<u>2</u>	<u>47.9</u>	280	4
18	<u>1638.67</u>	<u>2</u>	<u>47.9</u>	310	3
19	<u>1638.67</u>	<u>2</u>	<u>48.0</u>	307	3
20	<u>1638.64</u>	<u>2</u>	<u>48.0</u>	336	3
21	<u>1638.65</u>	<u>2</u>	<u>48.0</u>	318	3
22	1954.86	3	50.8	410	5
23	507.8	2	51.1	359	5
24	1510.54	2	57.6	190	3
25	740.25	2	59.8	278	5
26	1478.5	2	61.3	371	4
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•

同一イオンとみなせる
(質量数、価数、
保持時間にて判定)

重複するデータを
データベースから削除

第30図

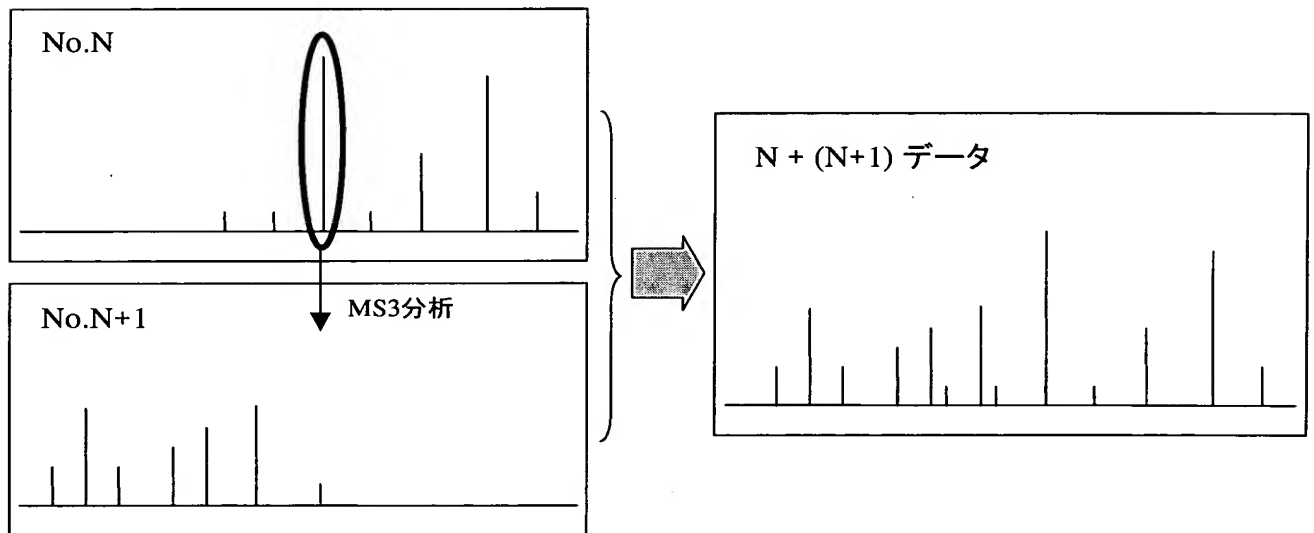


第31図

内部データベース					
No.	M [Da]	価数 z	τ [min]	Accumulation time[msec]	quality
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N	1638.67	2	47.7	359	3
N+1	838.68	1	47.7	439	2
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

MS²分析 → (quality 3)

MS³分析 → (quality 2)

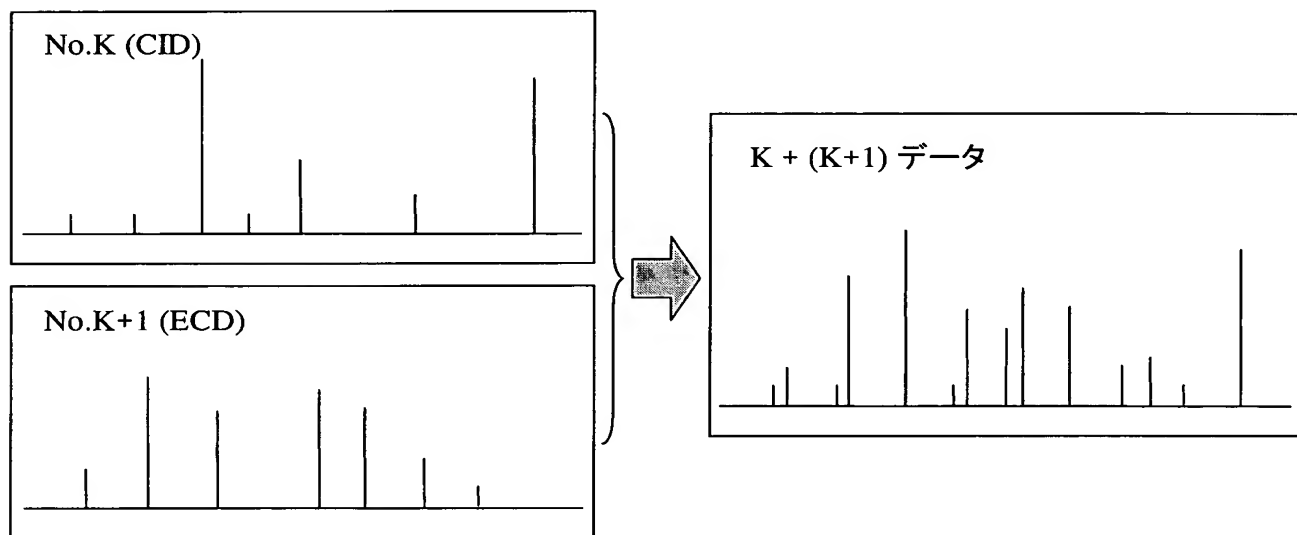


第32図

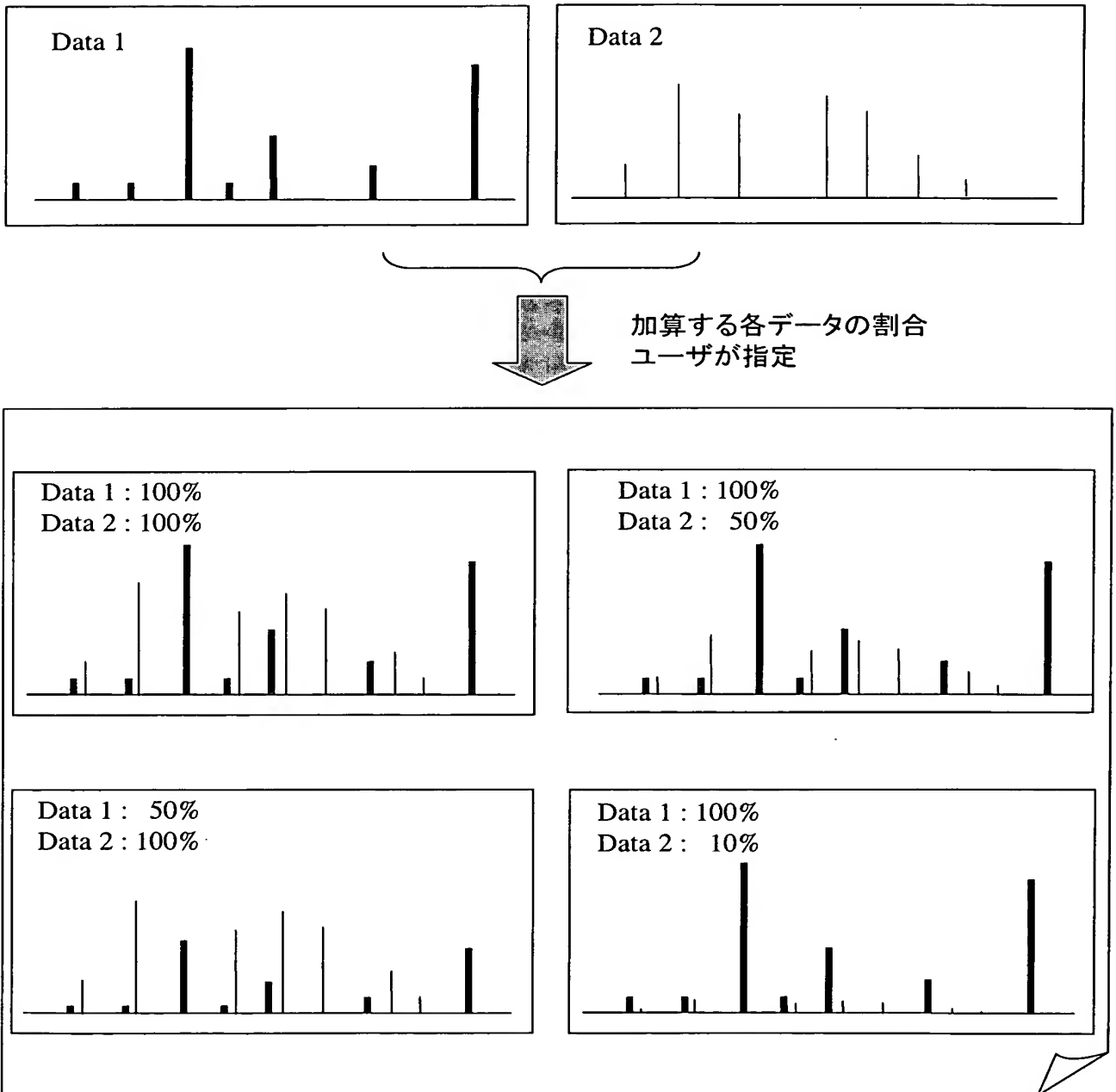
内部データベース					
No.	M [Da]	価数z	τ [min]	Accumulation time[msec]	quality
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
K	1638.67	2	47.7	359	3
K+1	1638.68	2	47.7	339	3
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•

衝突誘起解離(CID)によるデータ

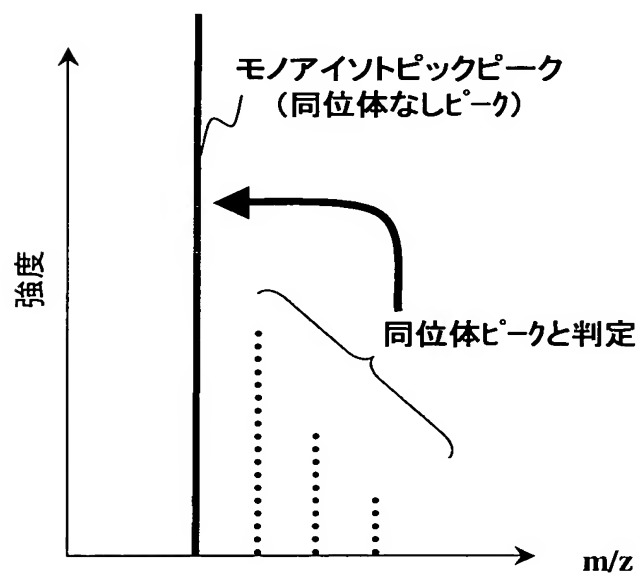
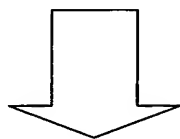
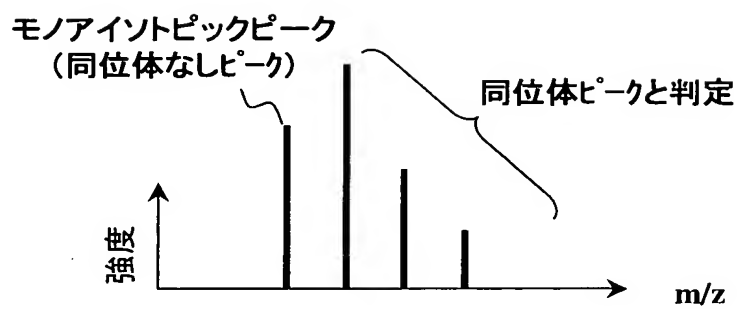
電子捕獲解離(ECD)によるデータ



第33図

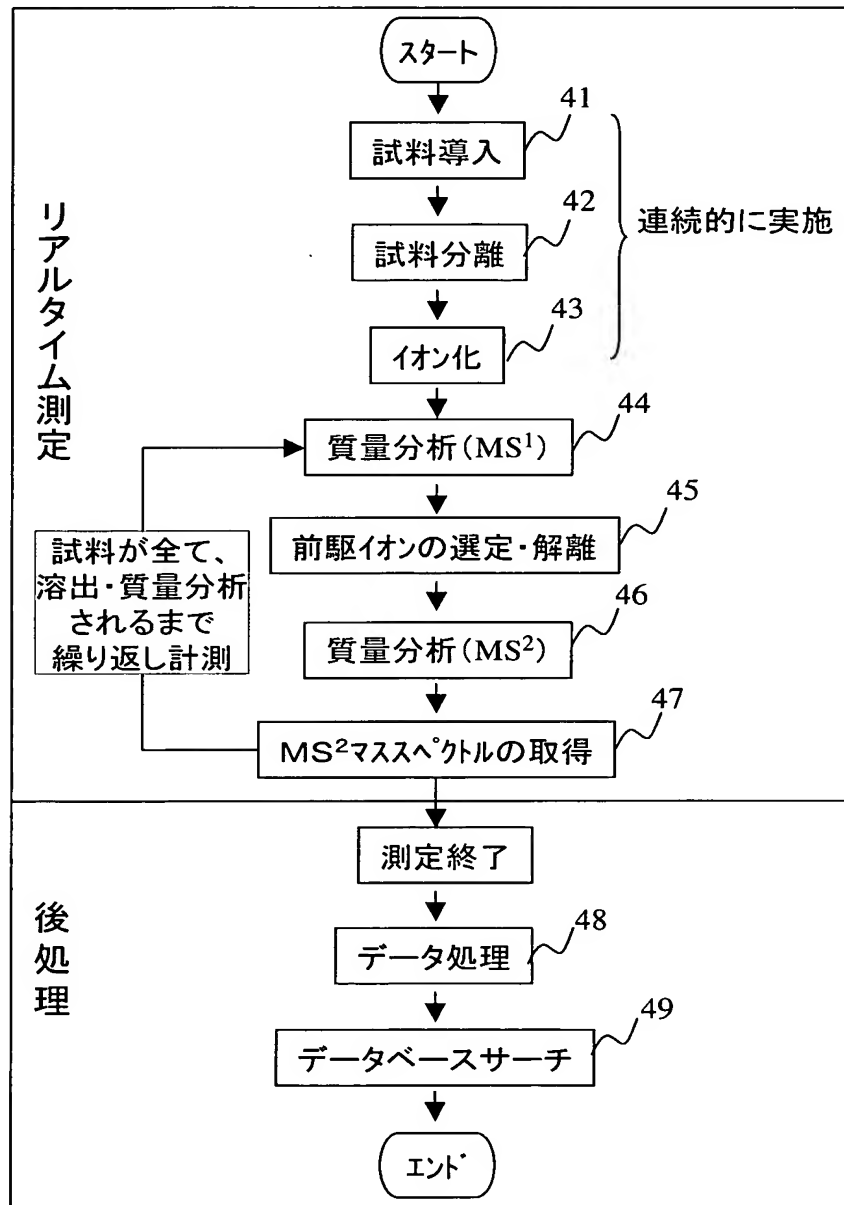


第34図



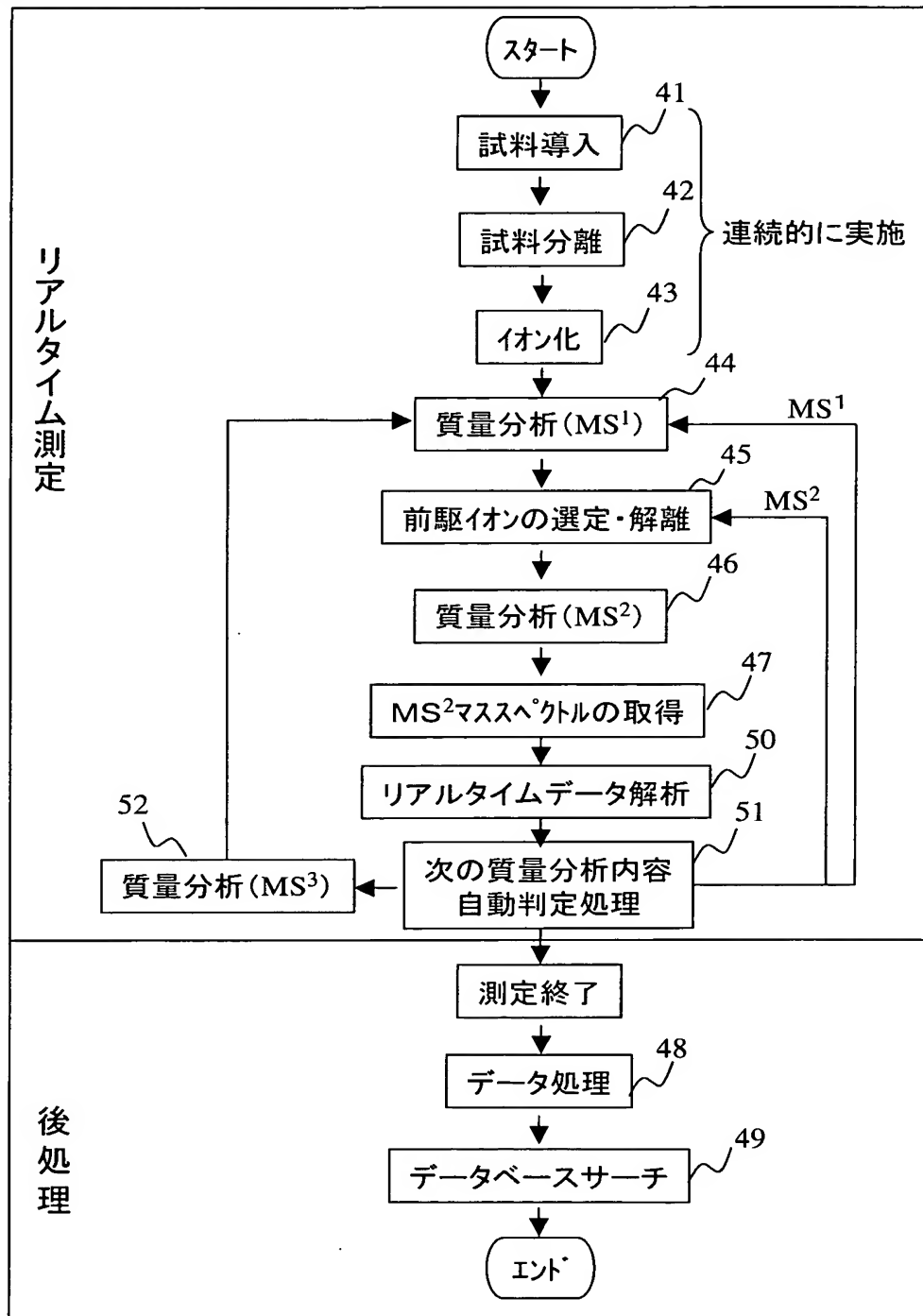
第35a図

従来のタンパク質解析及び同定フロー

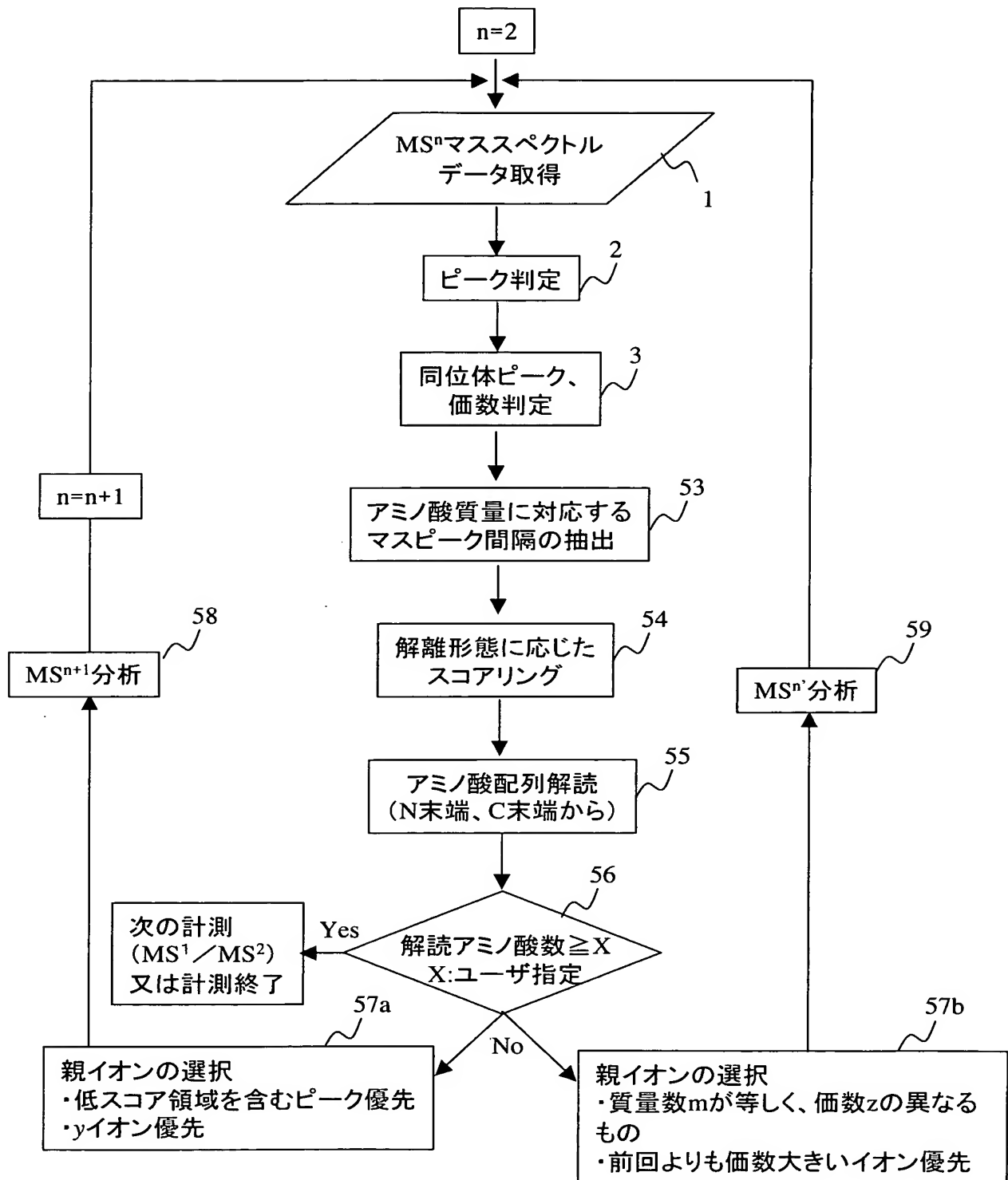


第35b図

本実施例のタンパク質解析及び同定フロー

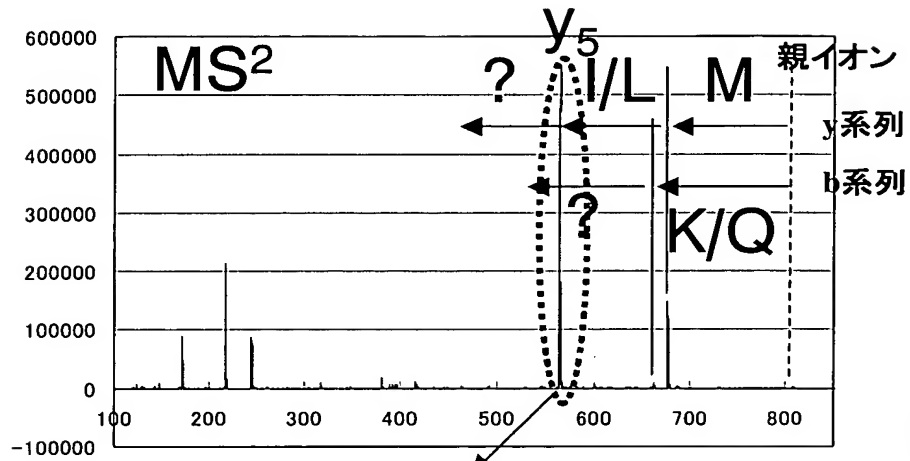


第36図

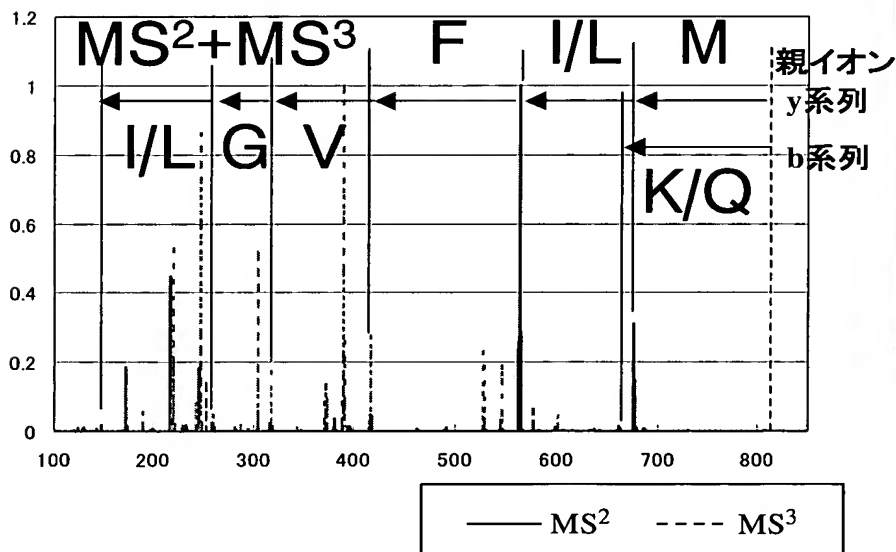


第37図

MIFVGIK



m/z=563.2 MS³分析実施



後処理

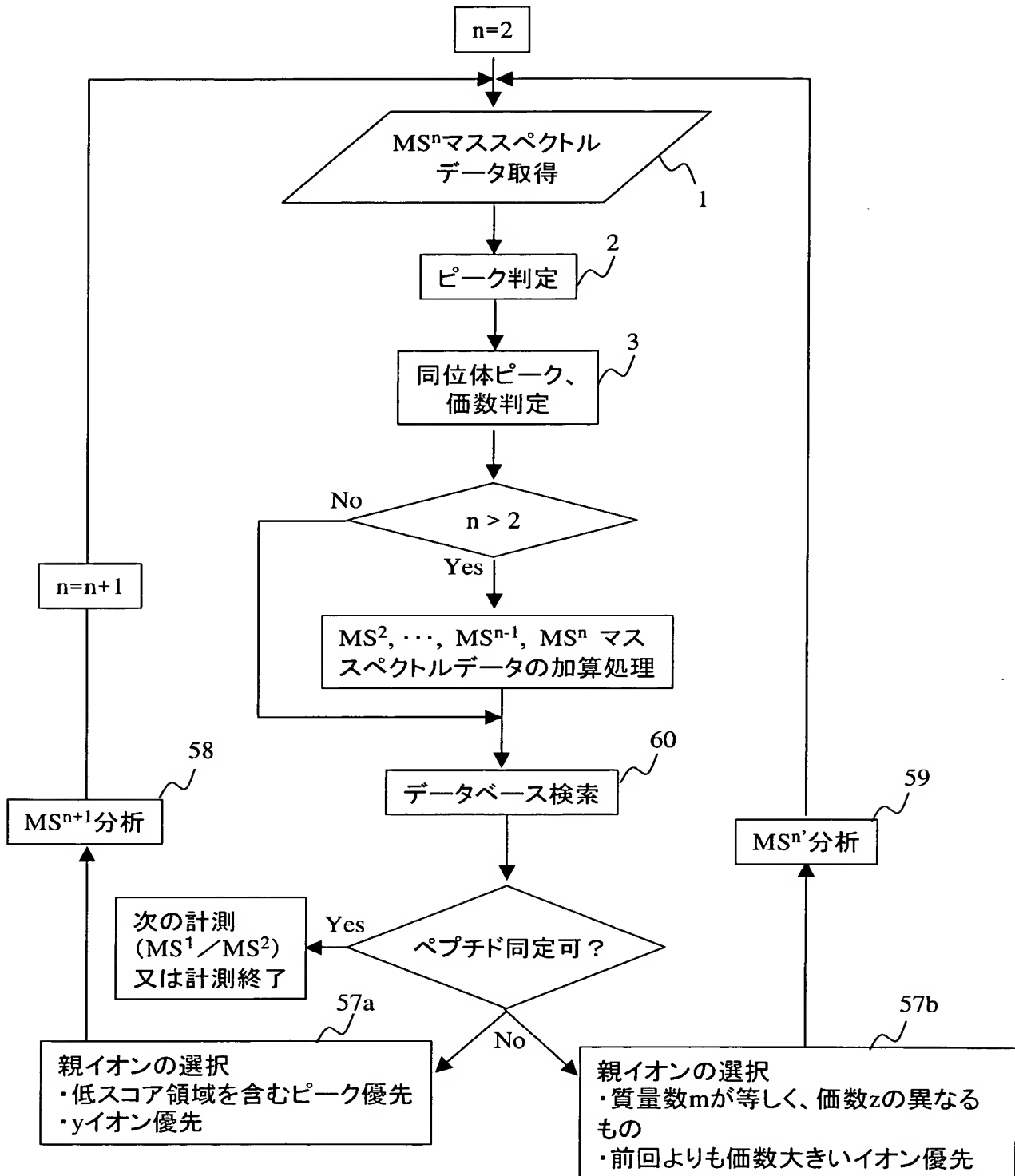
データベース検索
正解配列: 10位以下



データベース検索
正解配列: 1位

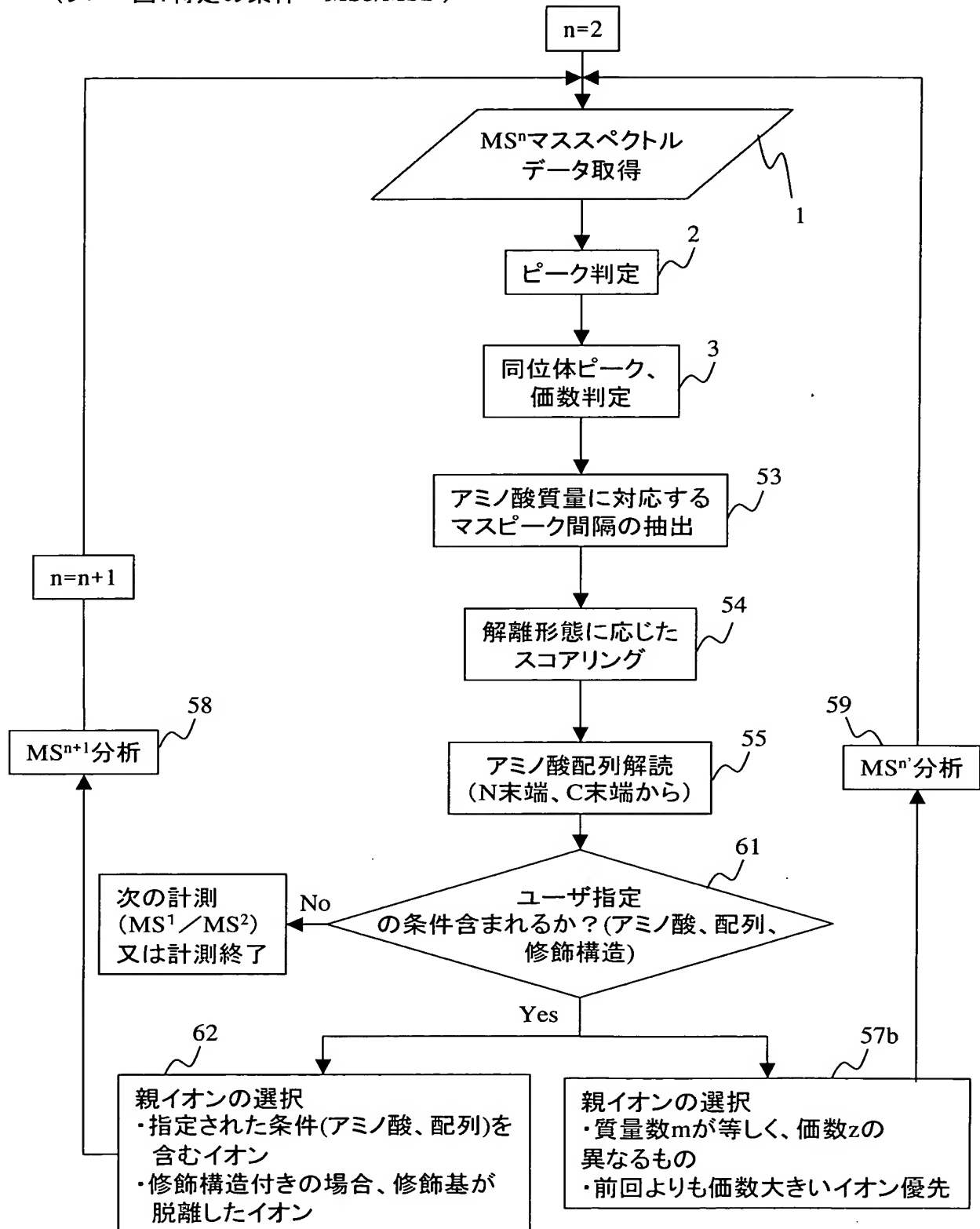
第38図

フロー図(リアルタイムデータベース検索)



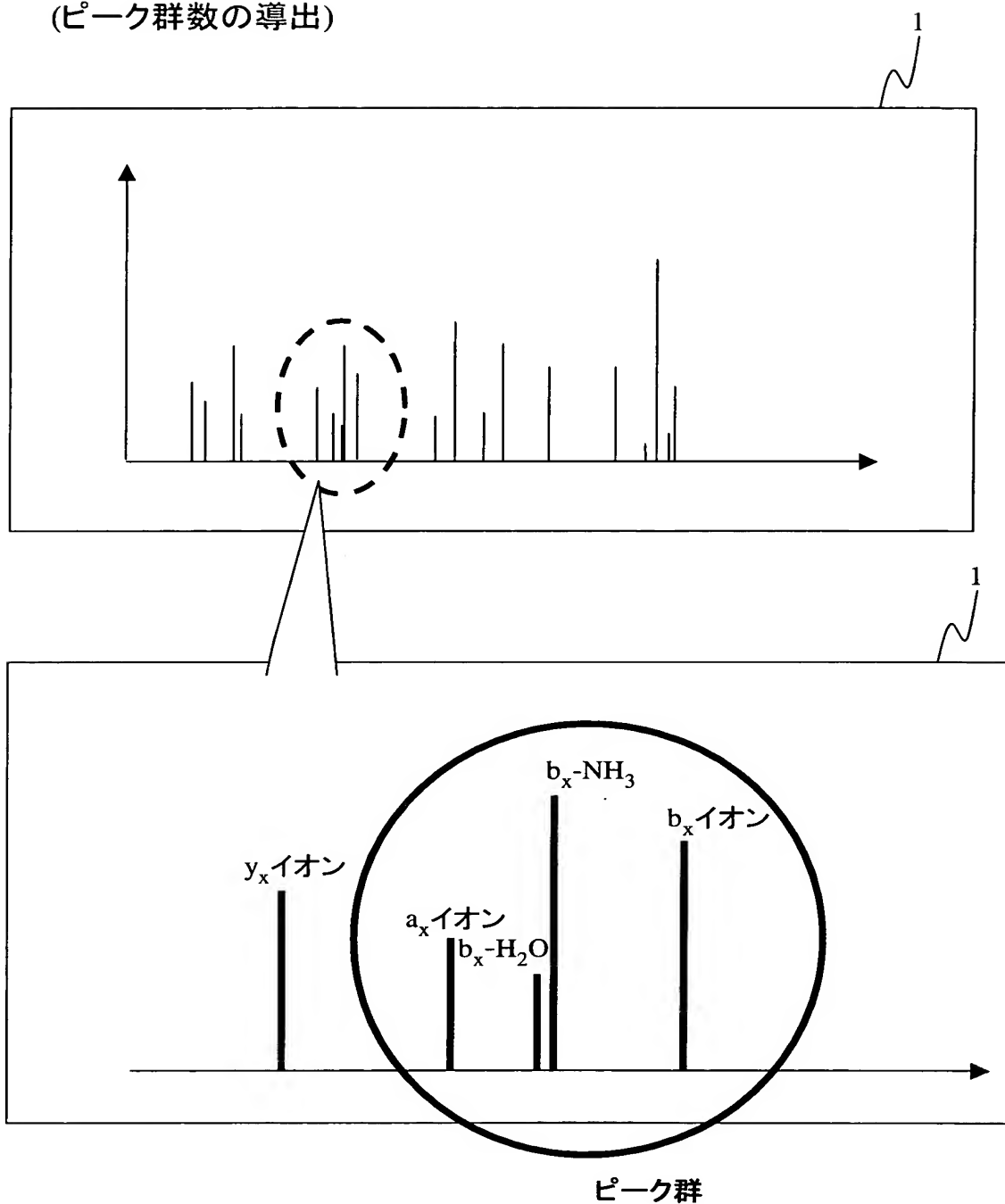
第39図

(フロー図: 特定の条件→MS3/MS2')



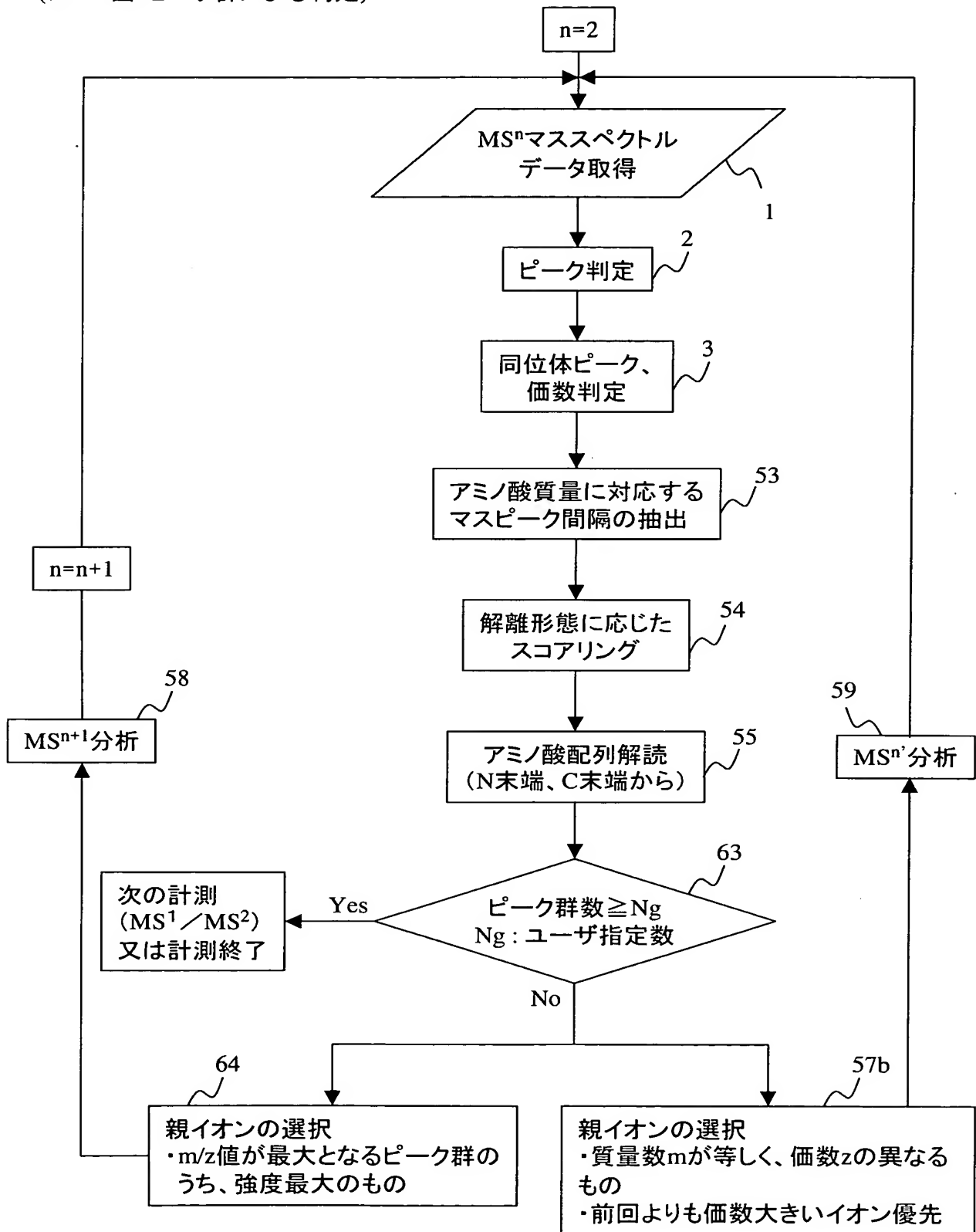
第40図

(ピーク群数の導出)



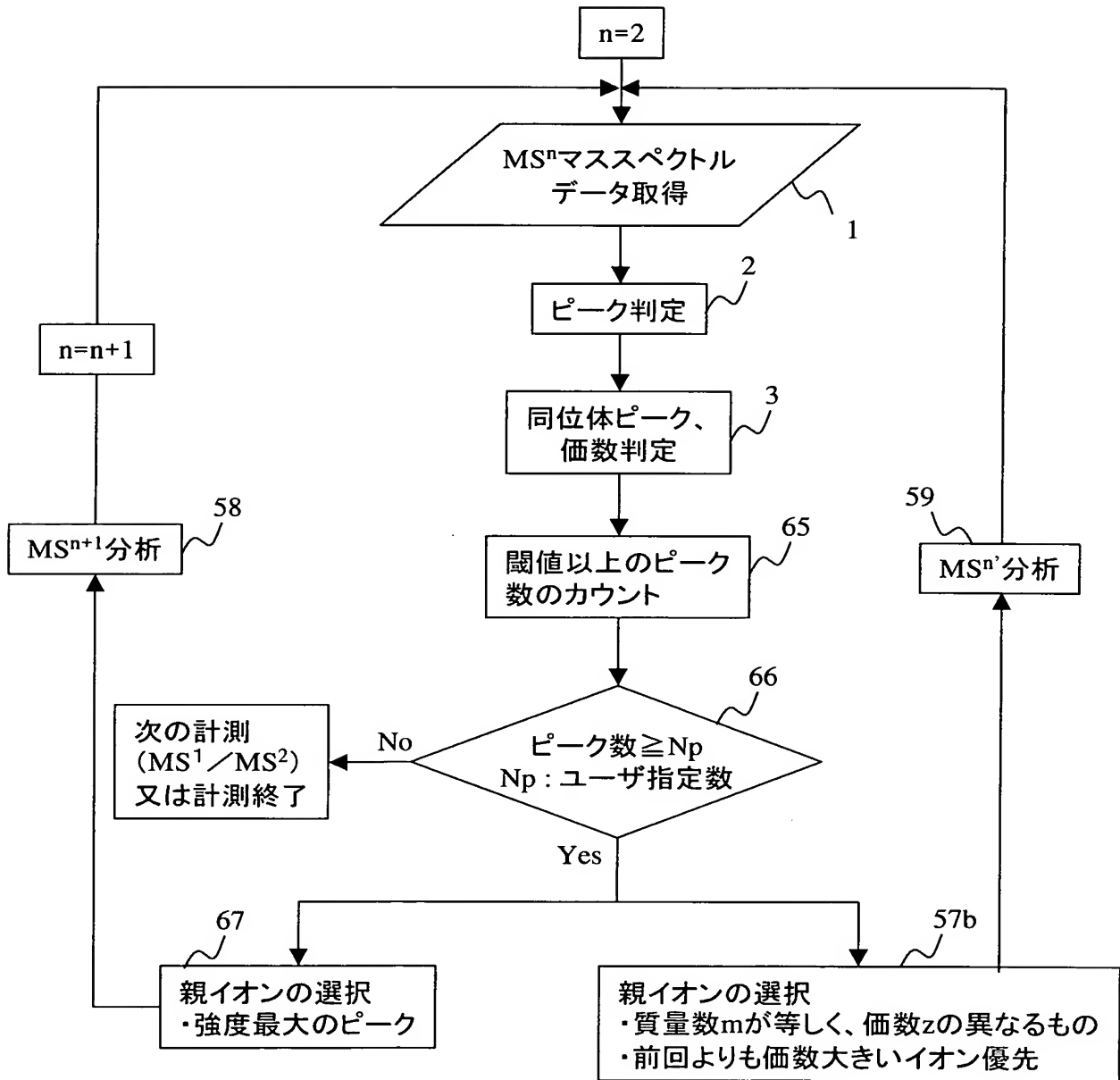
第41図

(フロー図: ピーク群による判定)

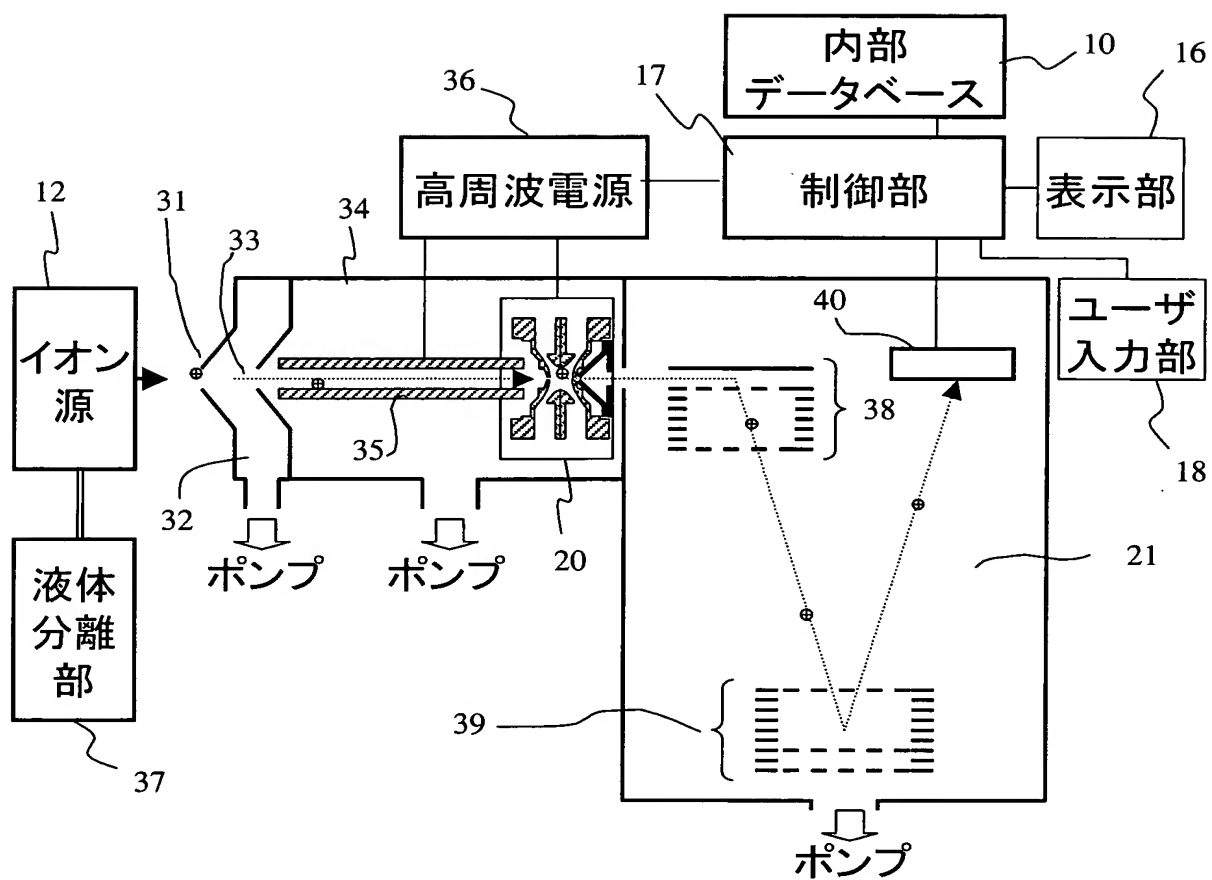


第42図

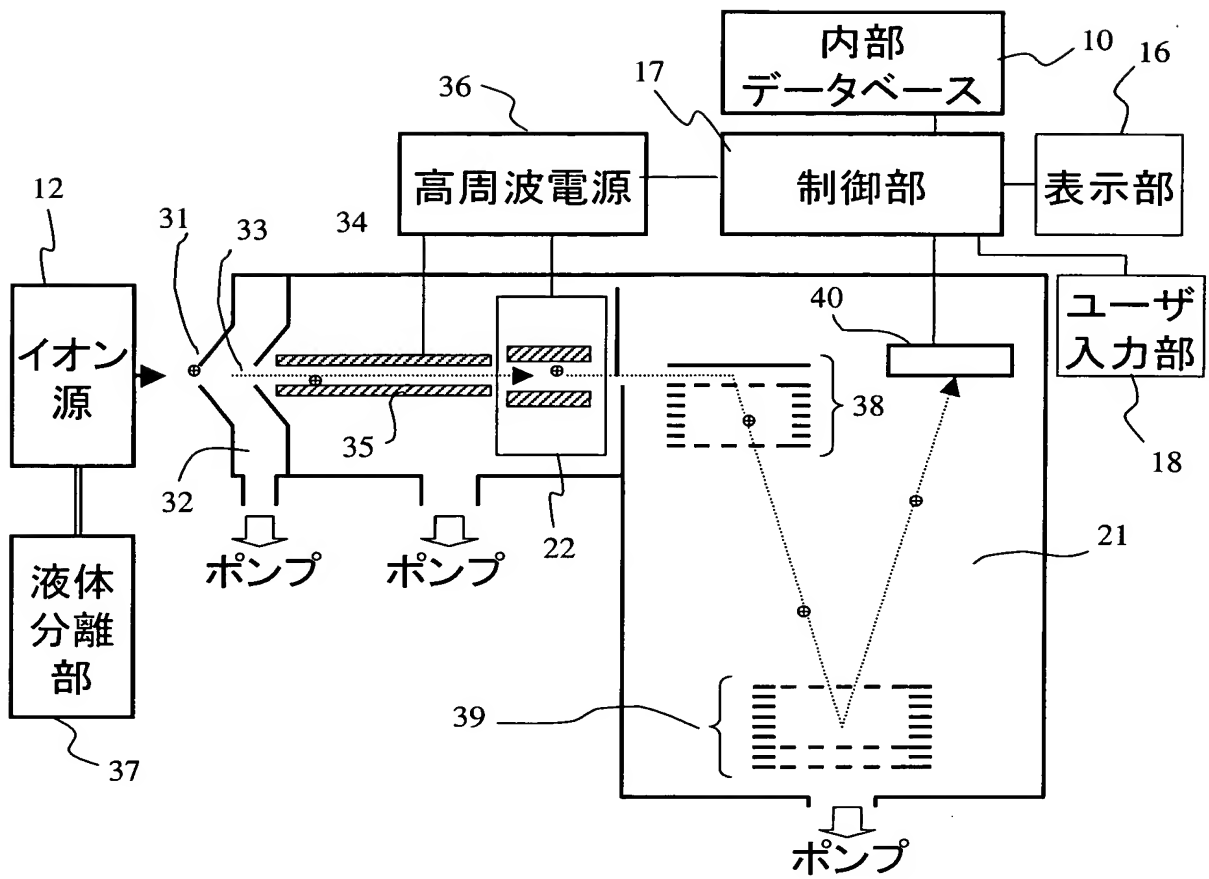
(フロー図: ピーク数による判定)



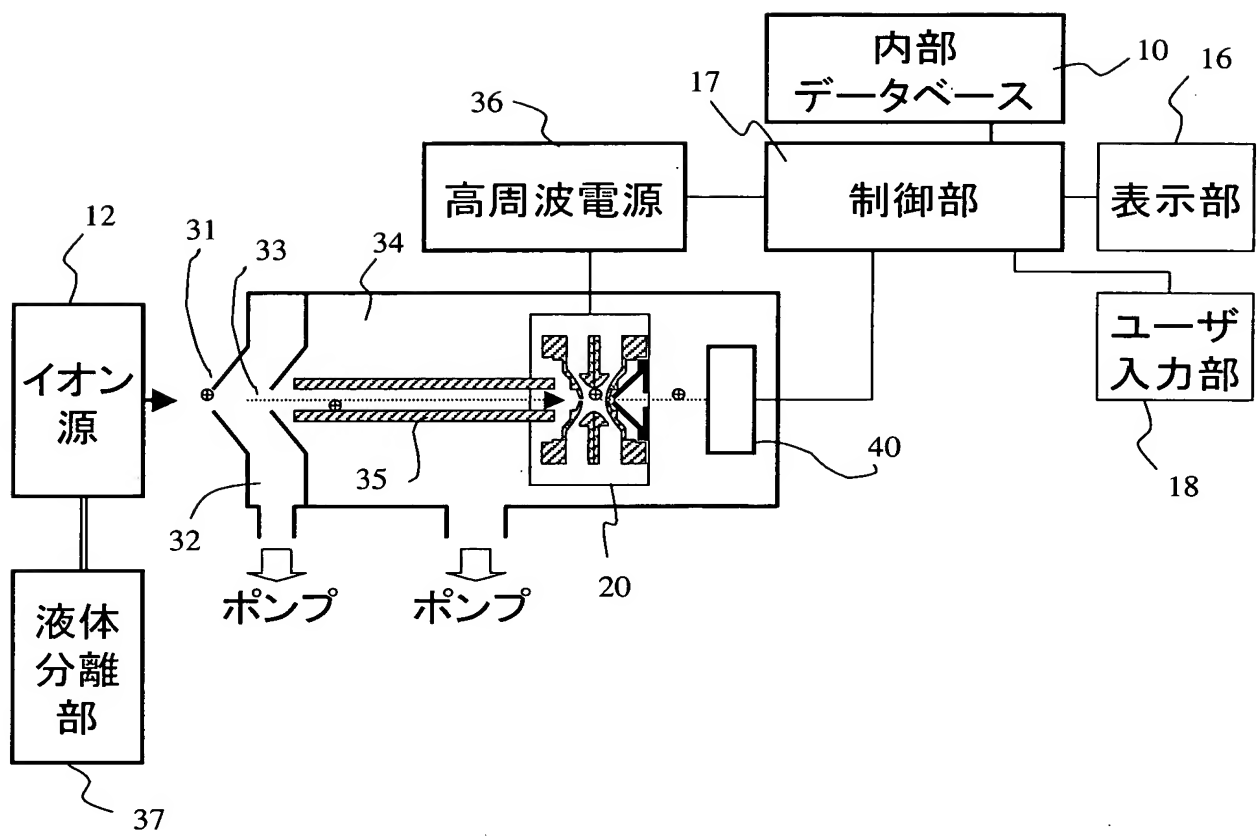
第43図



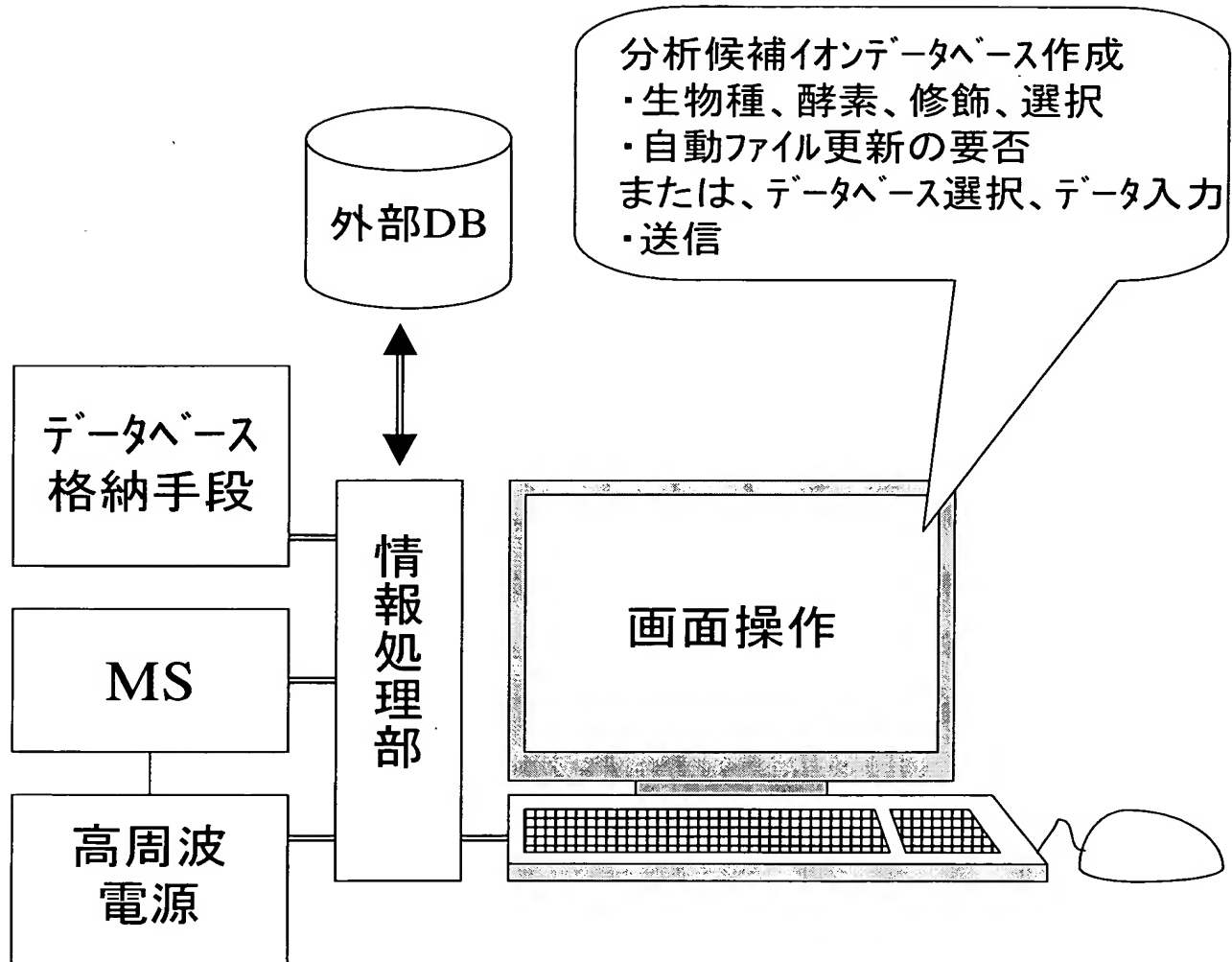
第44図



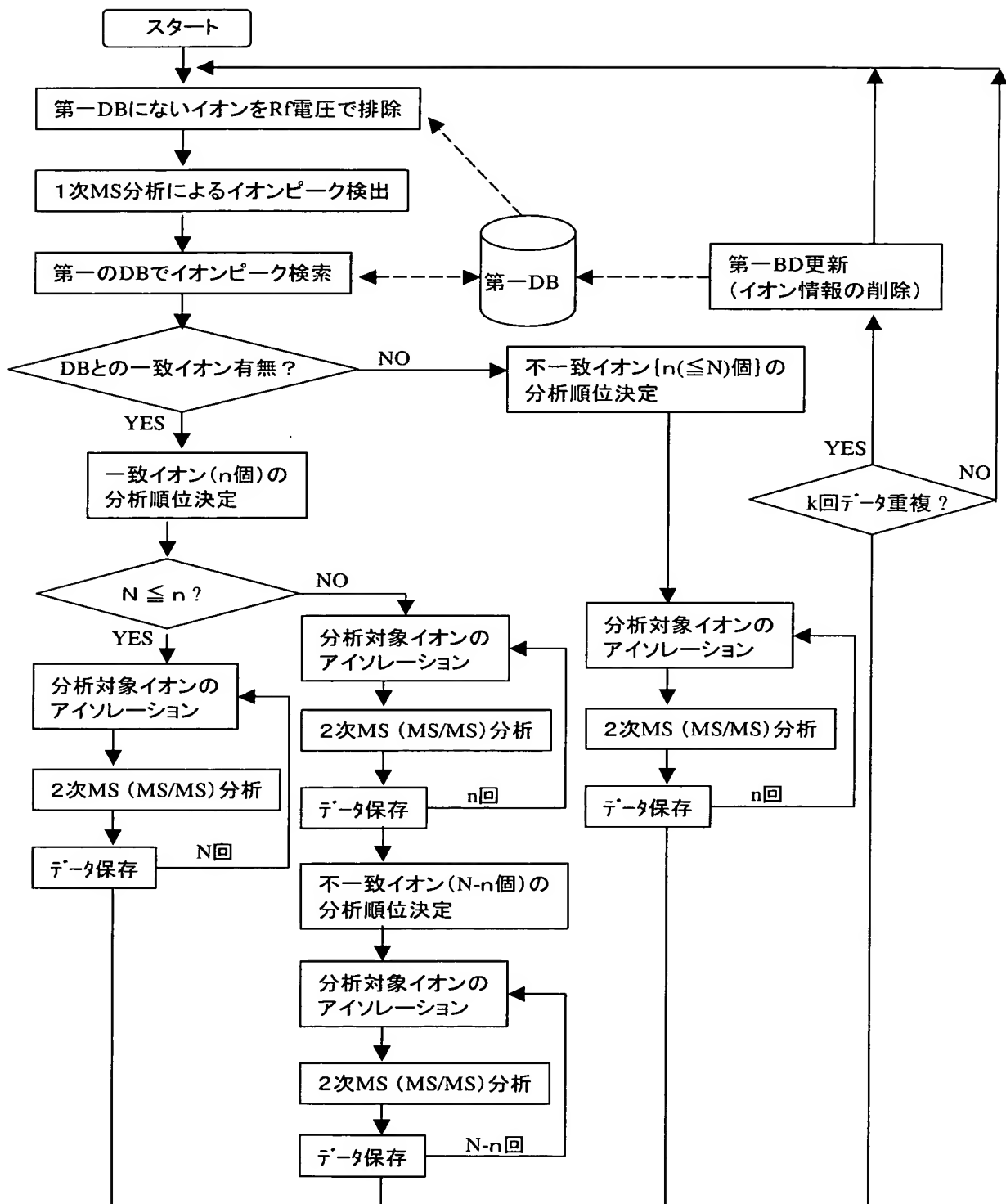
第45図



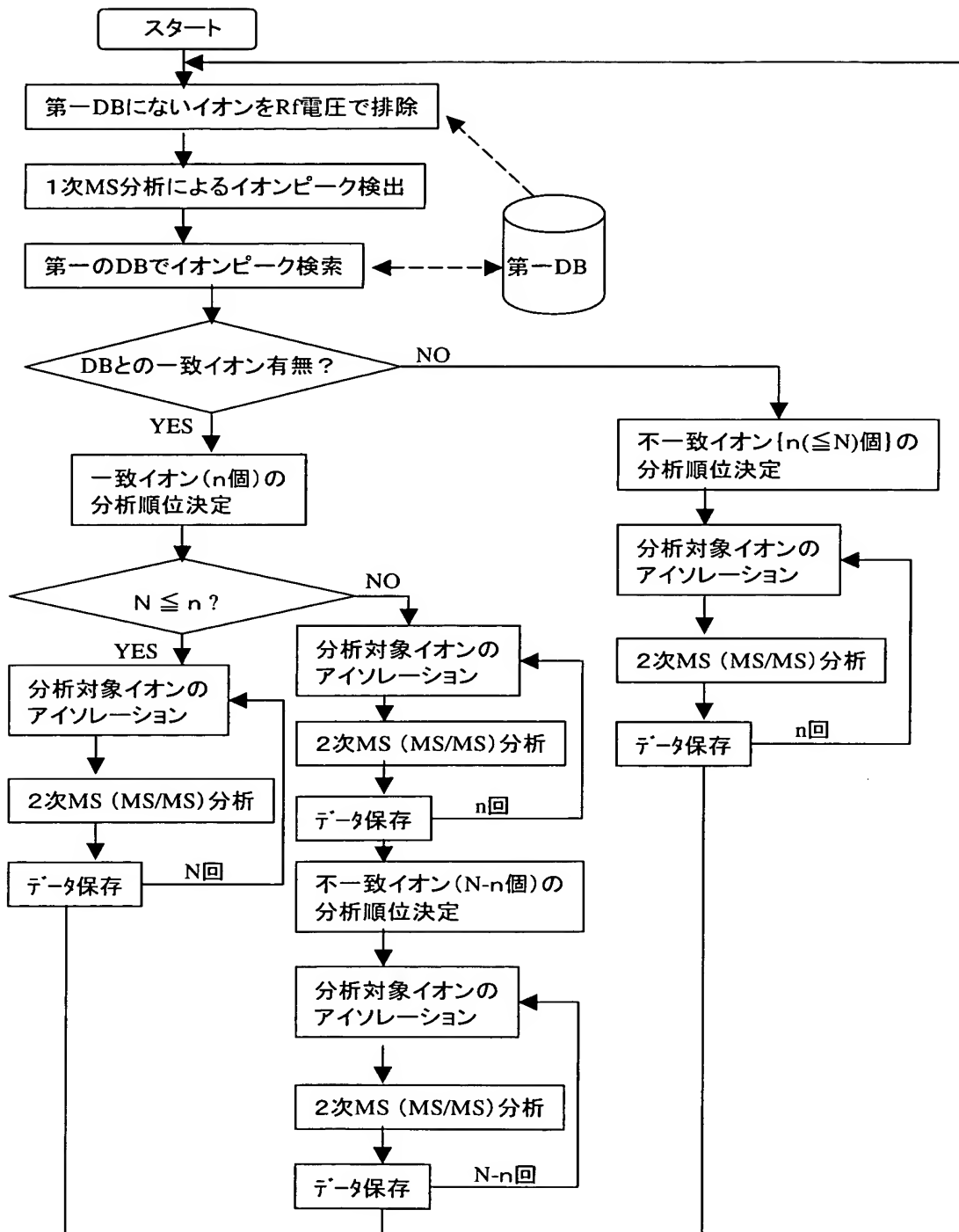
第46図



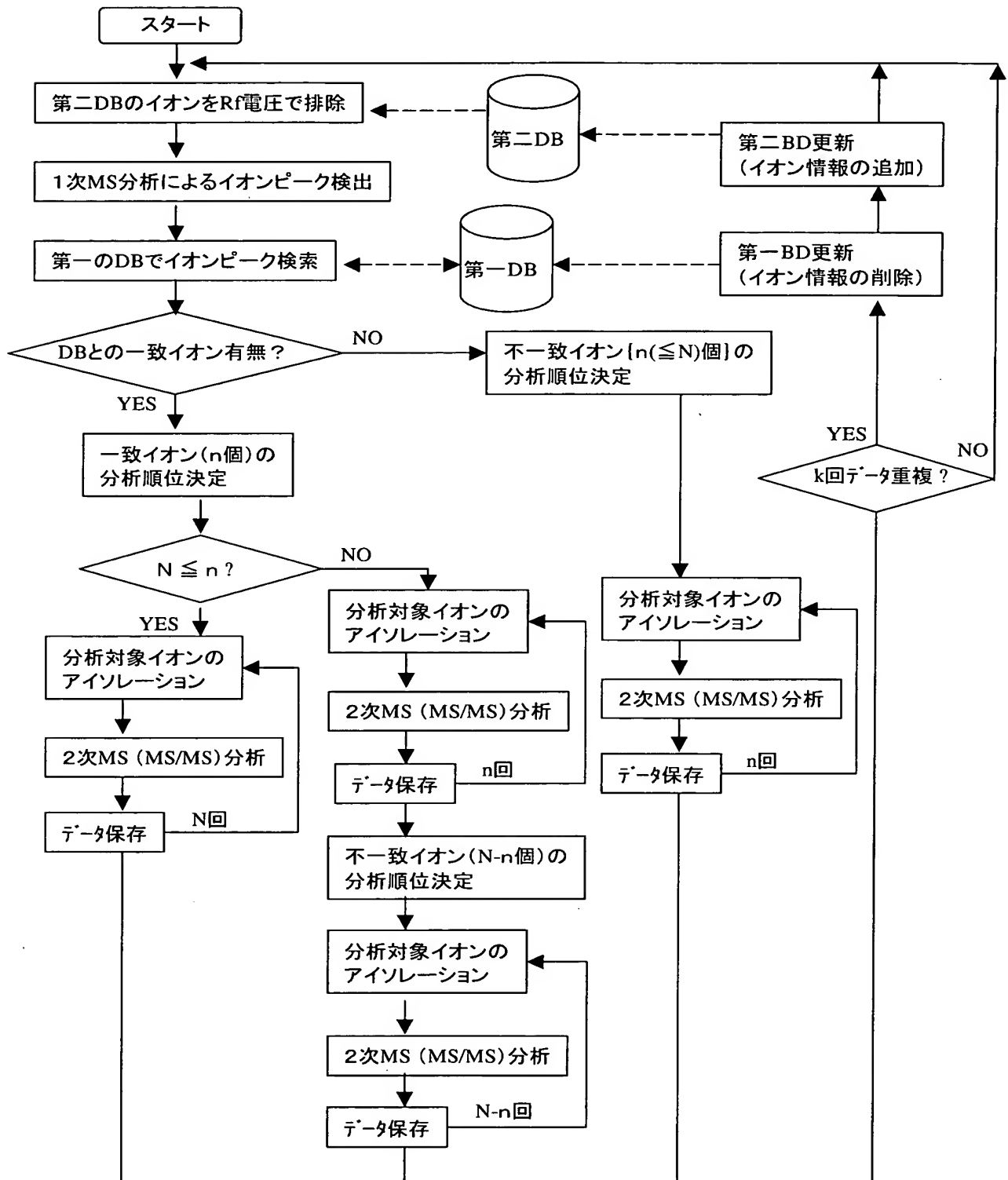
第47図



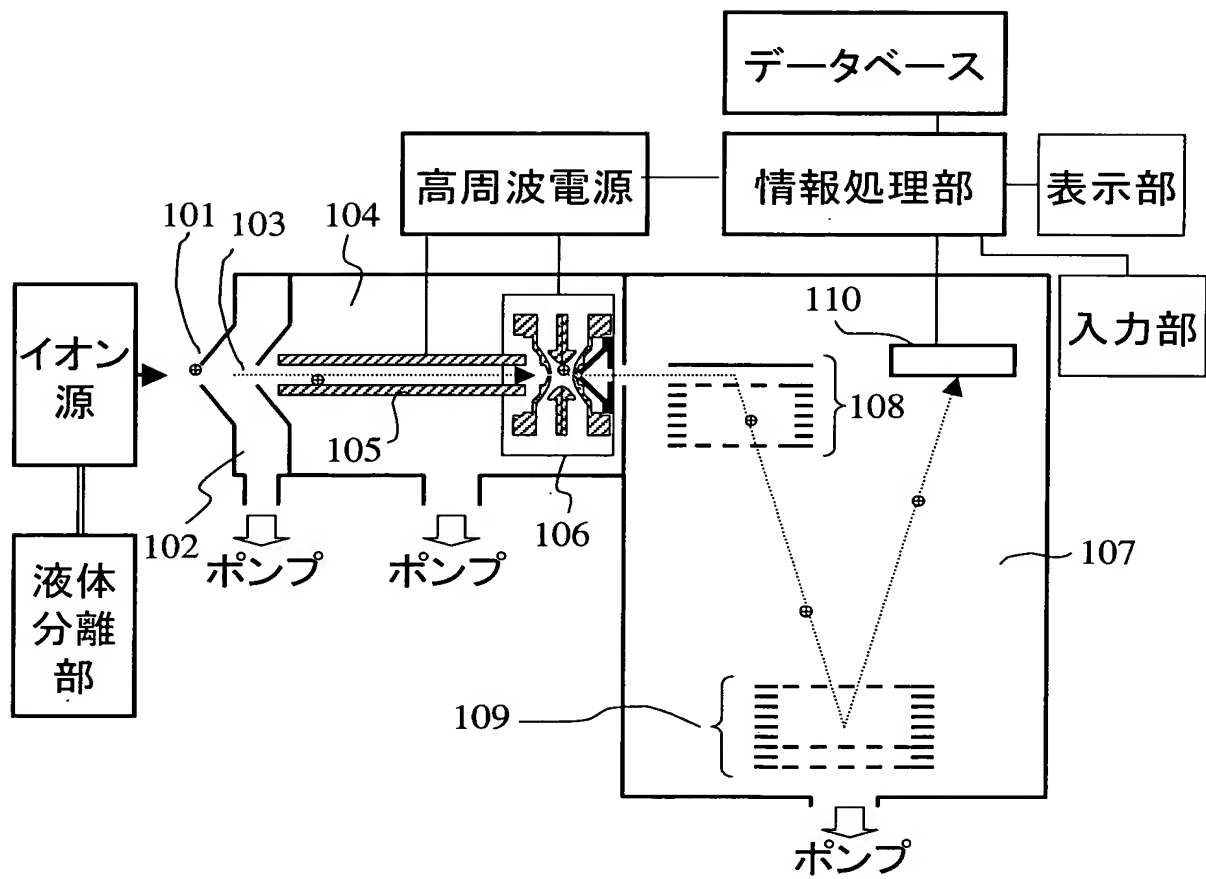
第48図



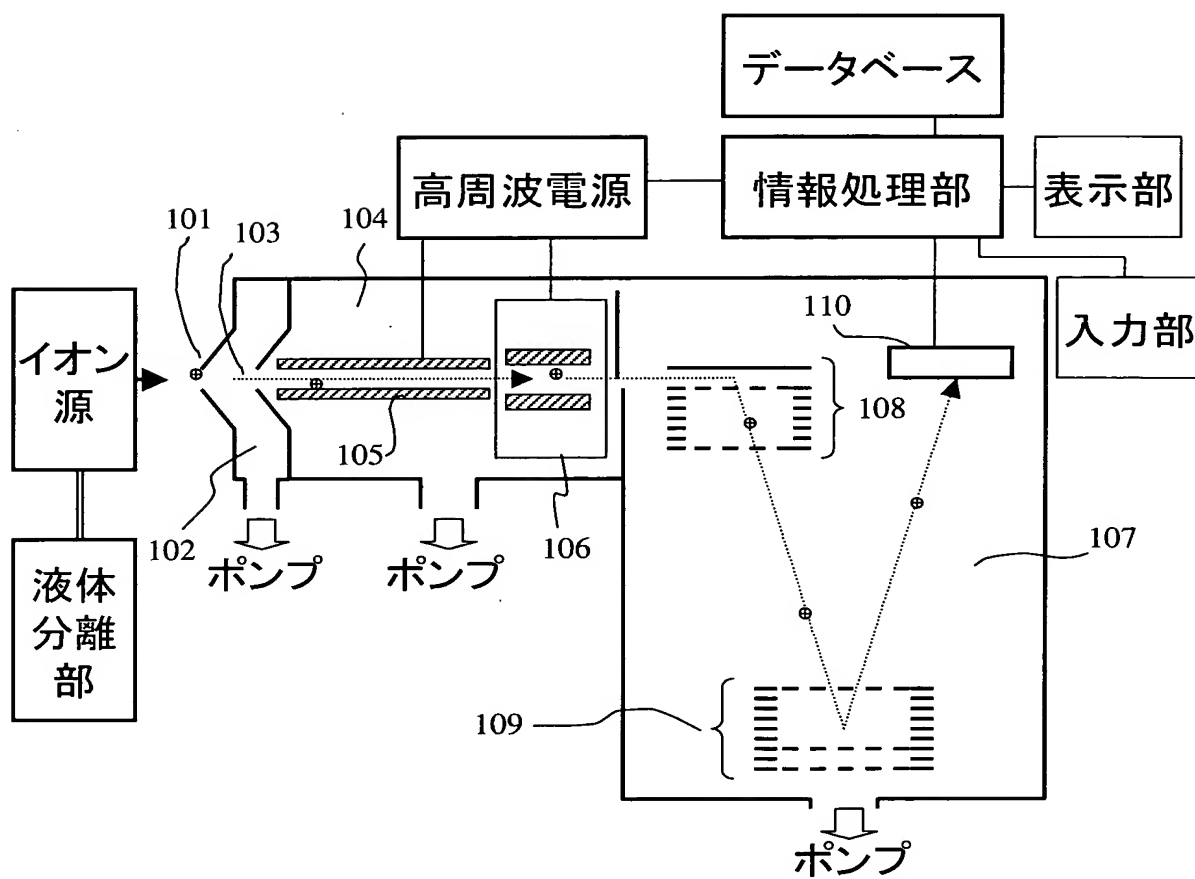
第49図



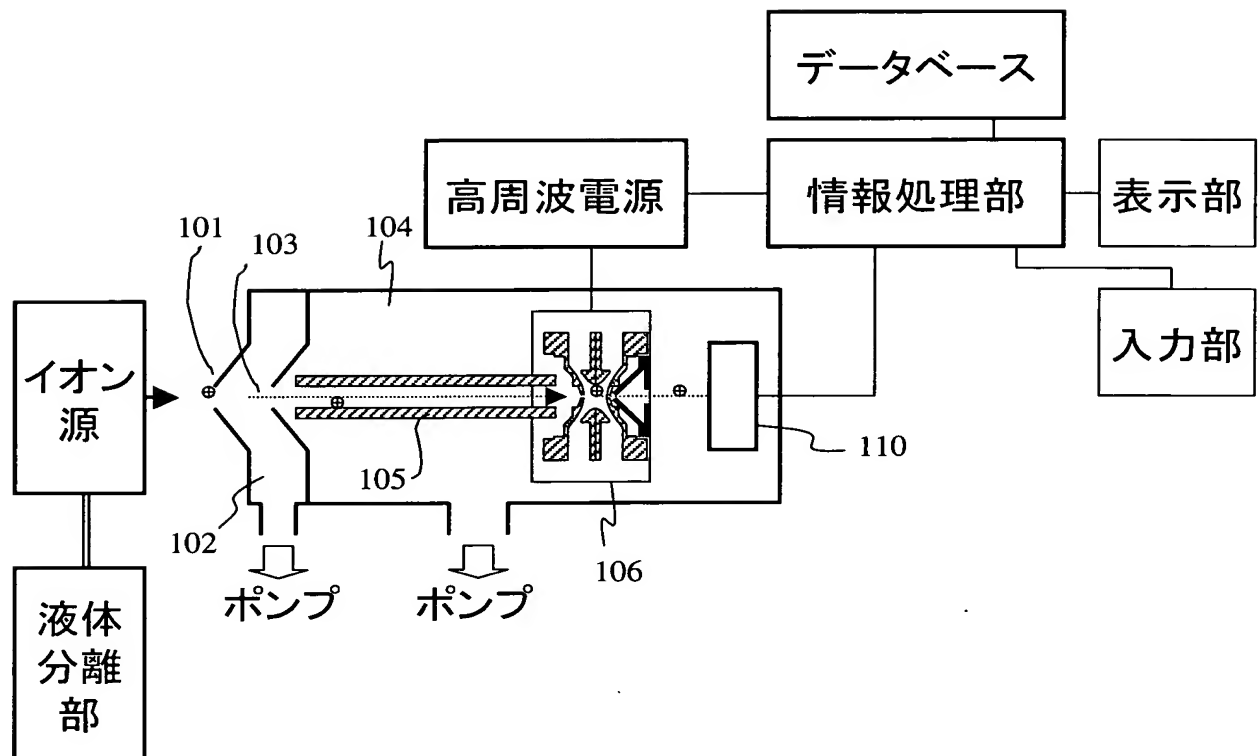
第50図



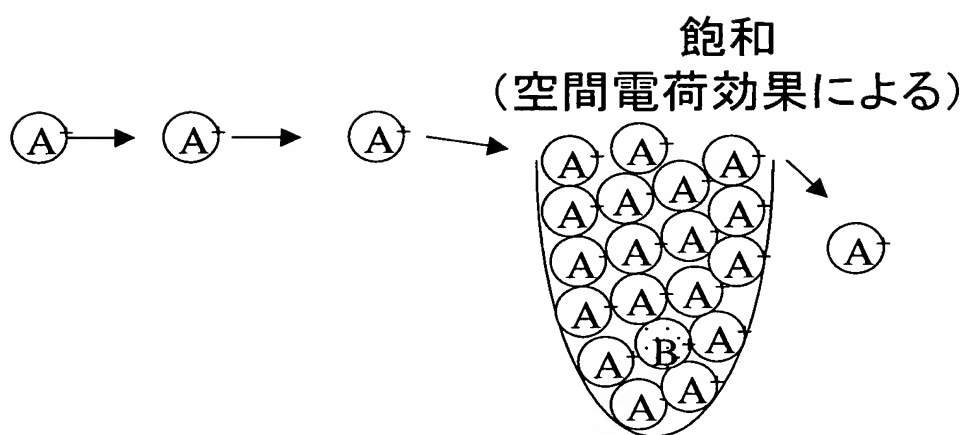
第51図



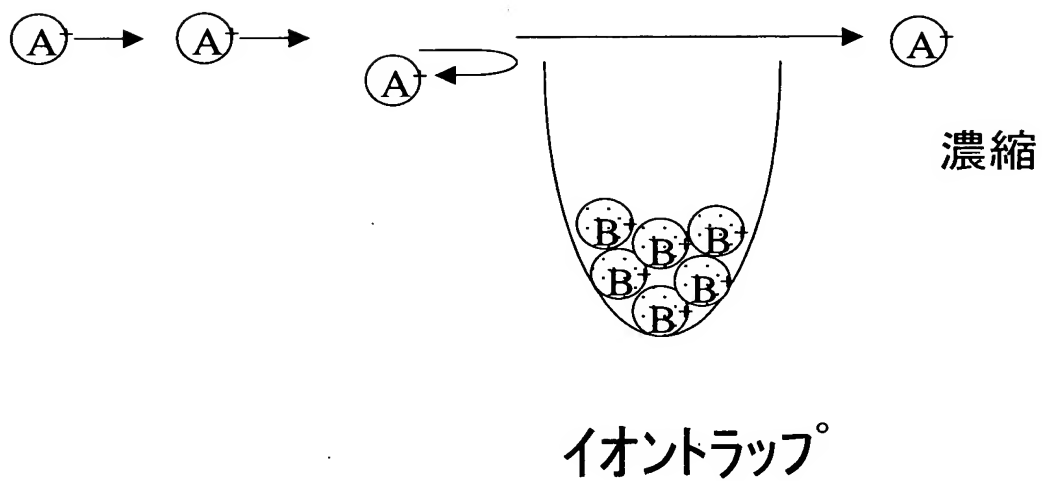
第52図



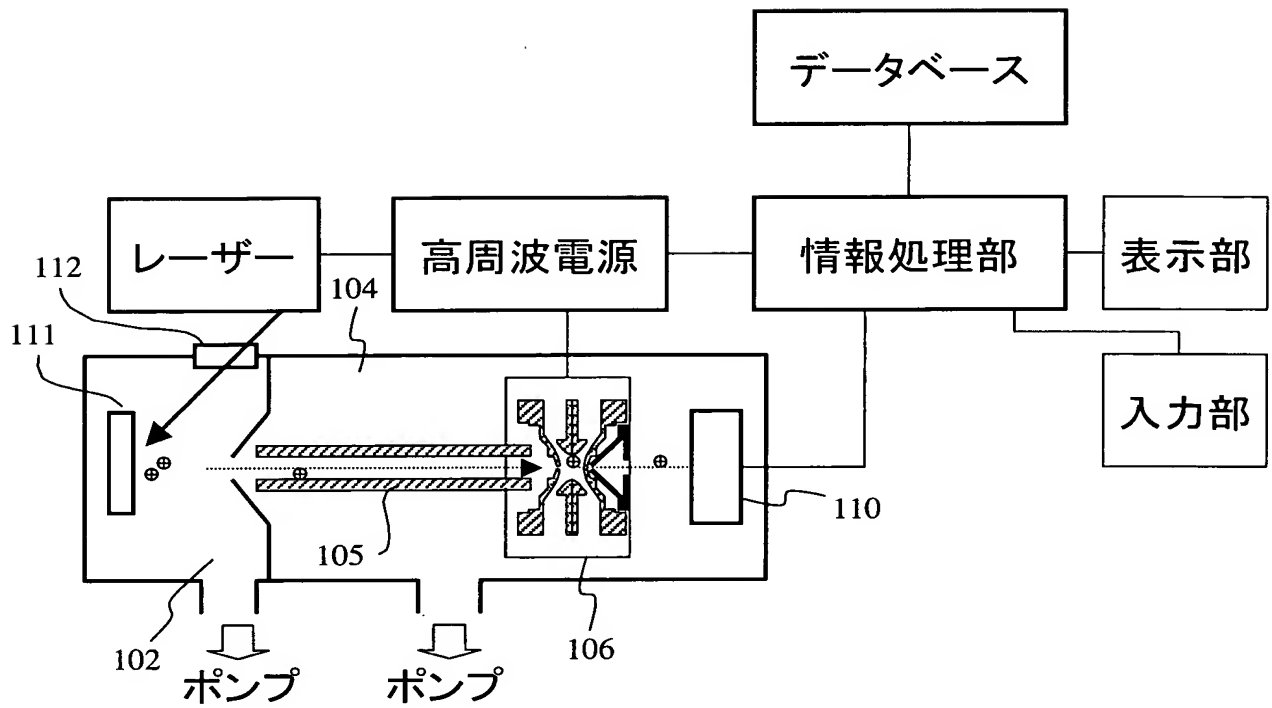
第53a図



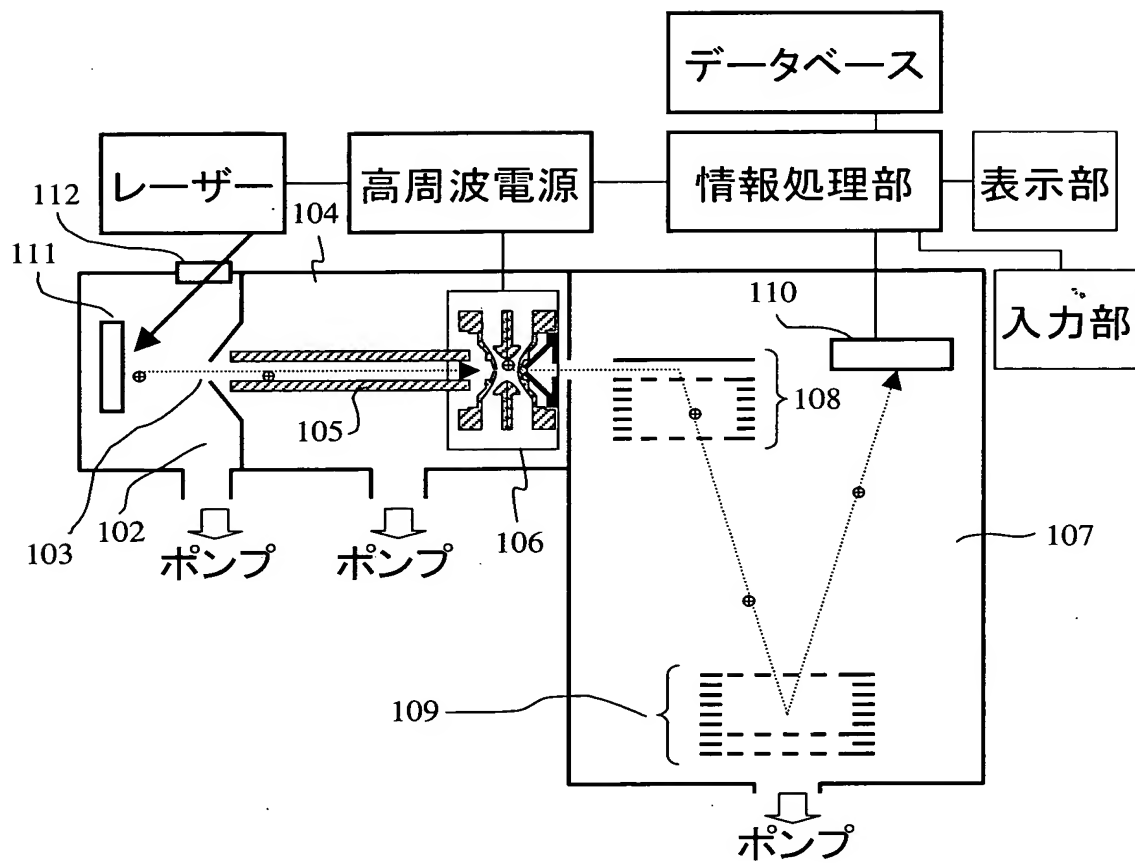
第53b図



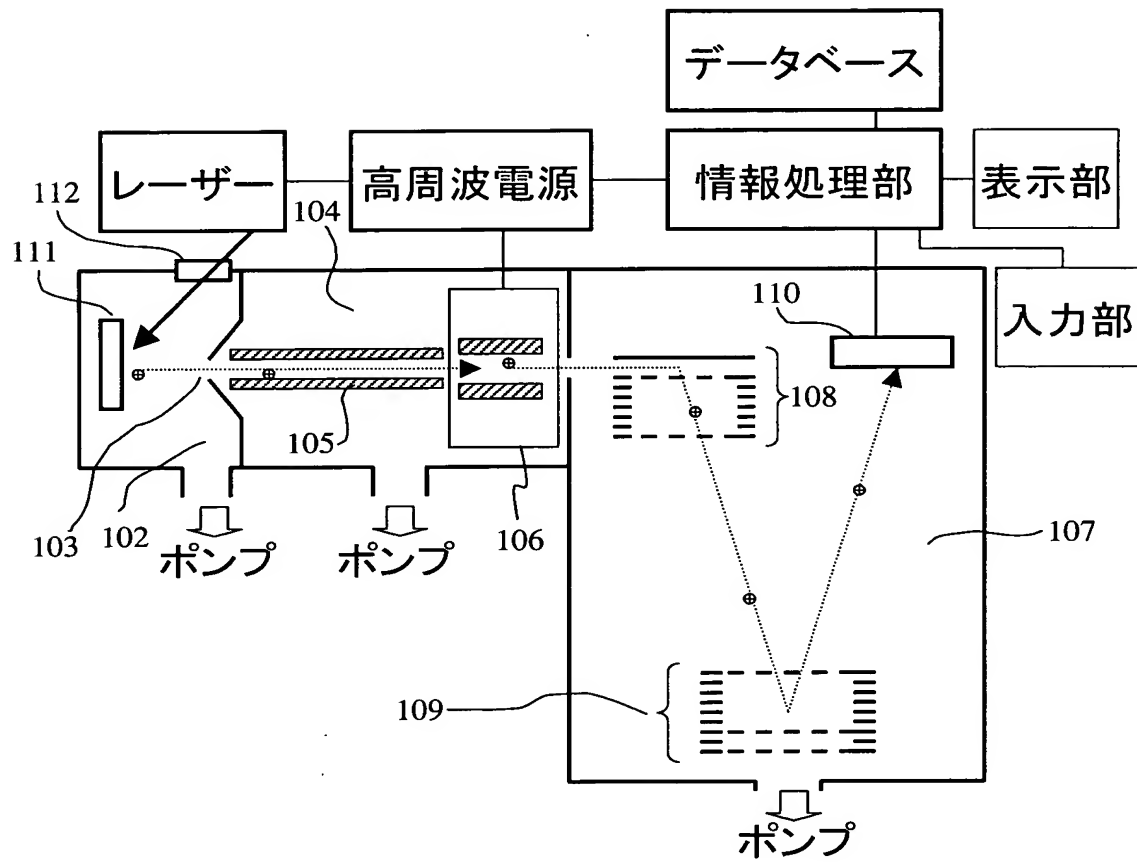
第54図



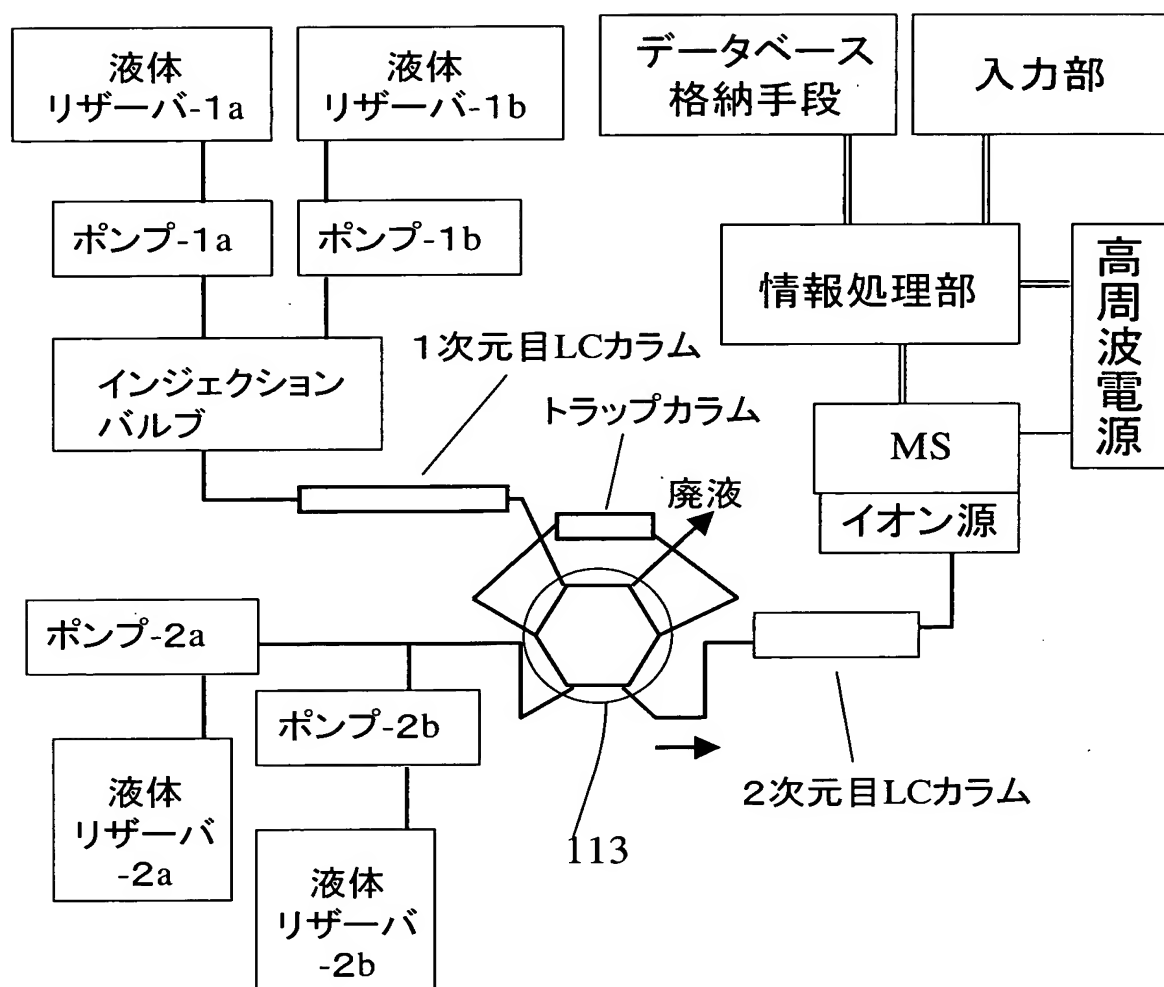
第55図



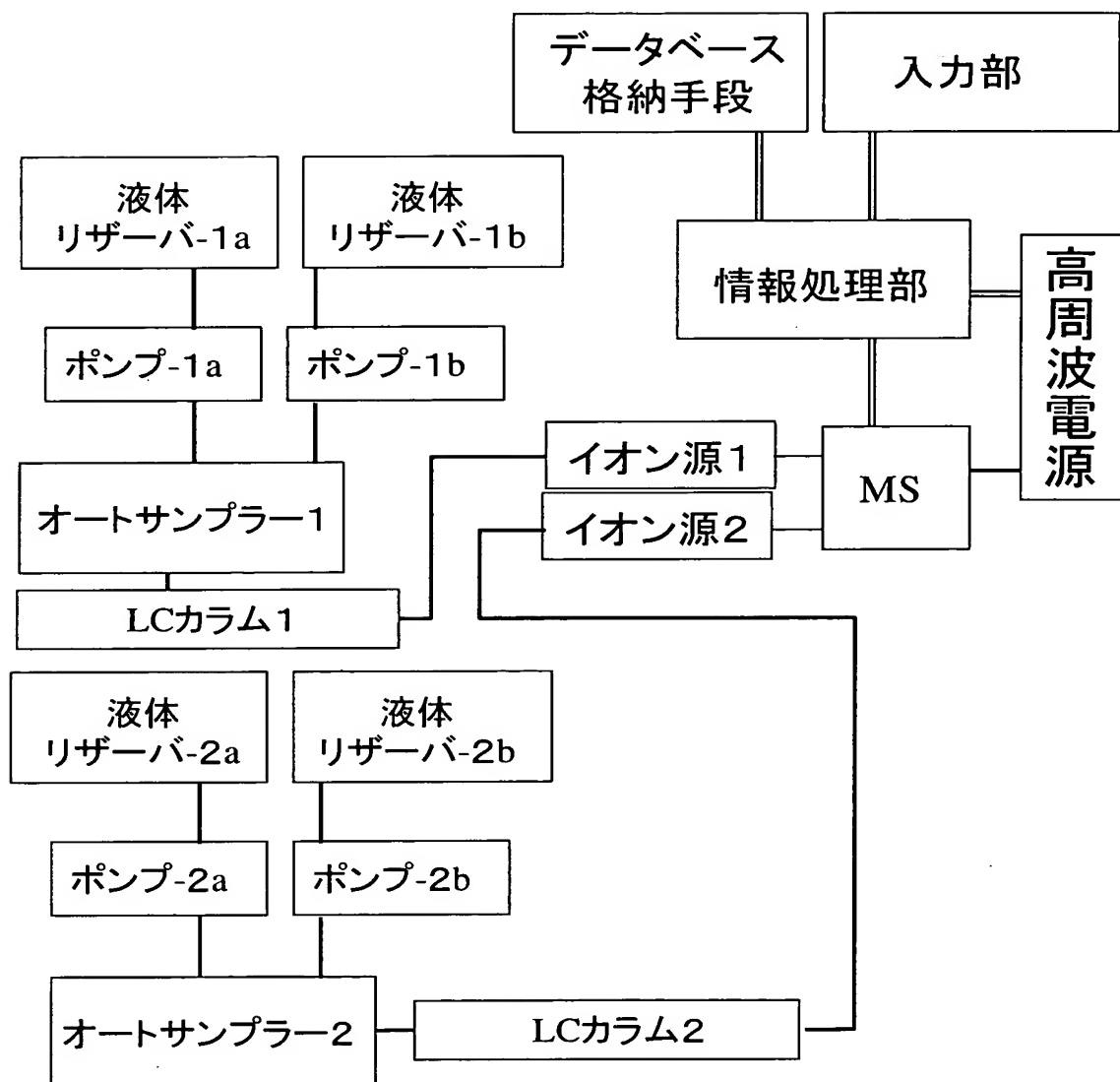
第56図



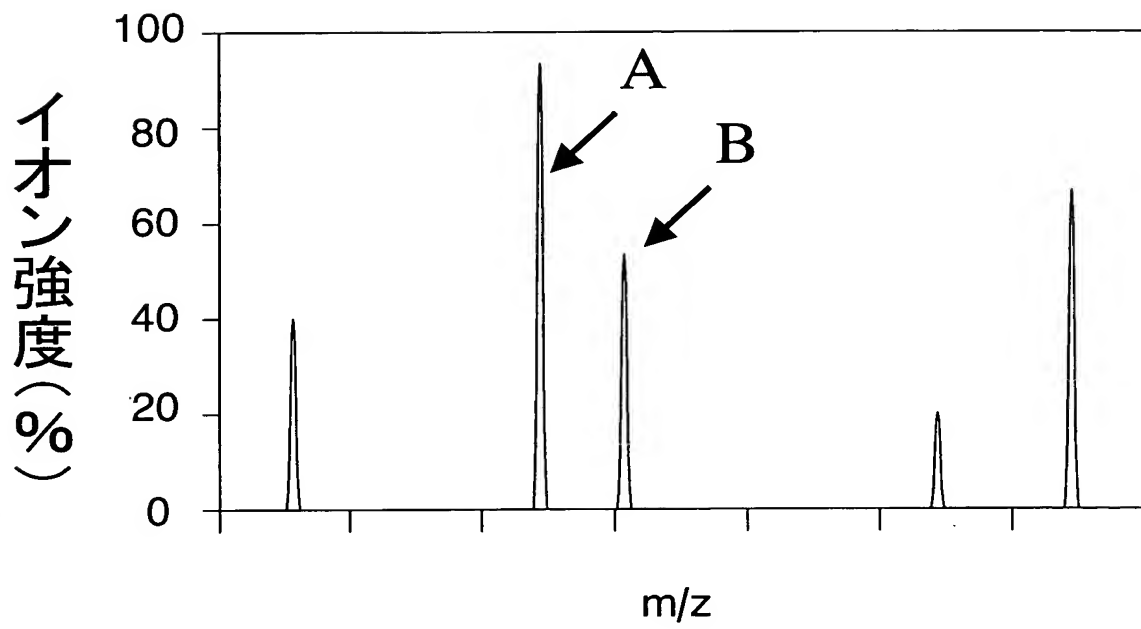
第57図



第58図



第59図



第60図

